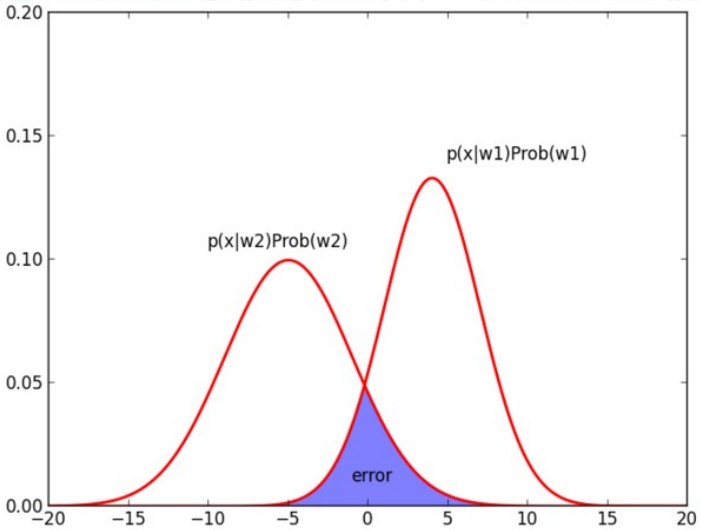
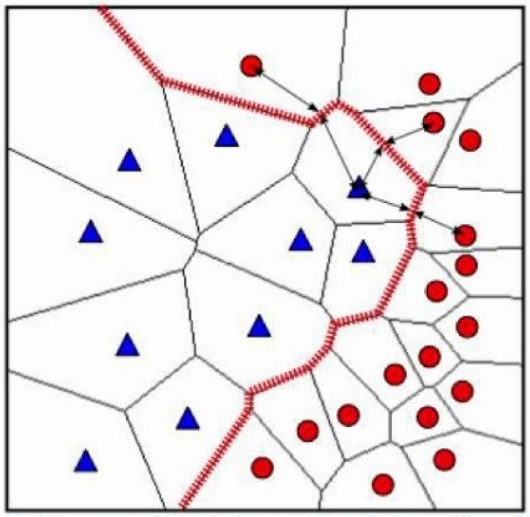
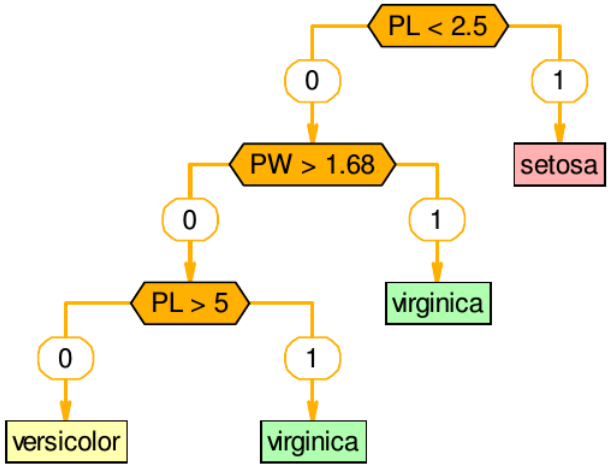
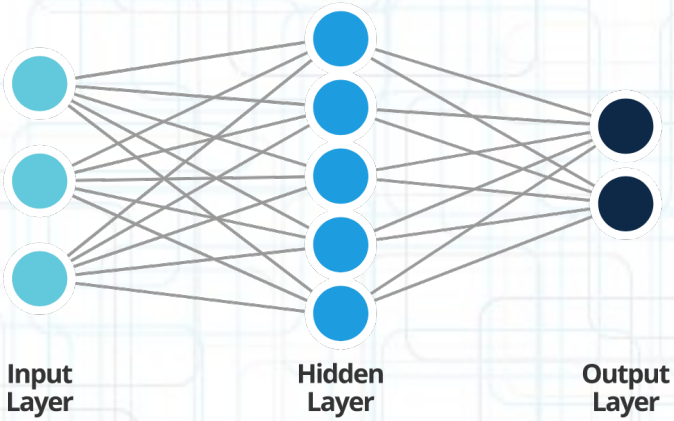
Алгоритмы машинного обучения

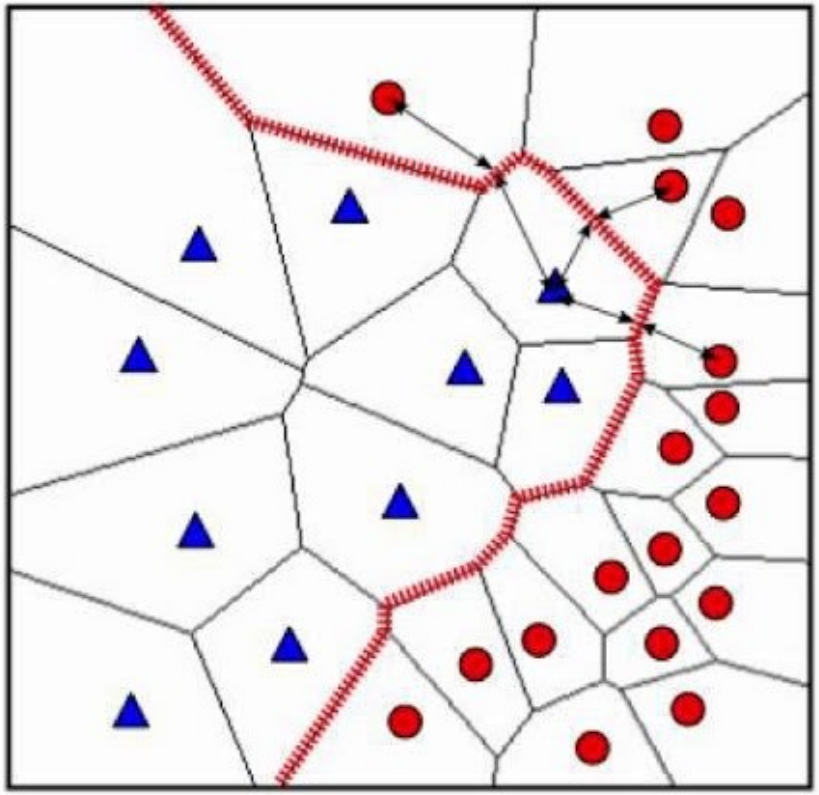








Метрические алгоритмы



Гипотезы

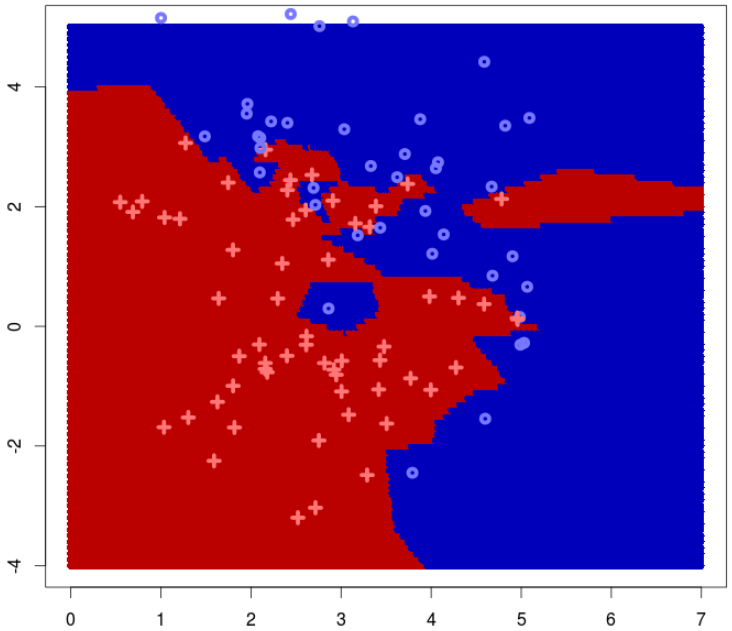
- Задачи классификации и регрессии:
  - X — объекты, Y — ответы;
  - $X_\ell = (x_i, y_i)$ — обучающая выборка;
- Гипотеза компактности (для классификации):
  - Близкие объекты, лежат в одном классе.
- Гипотеза непрерывности (для регрессии):
  - Близким объектам соответствуют близкие ответы.
- Формализация понятия «близости»:
  - Задана функция расстояния $\rho : X \times X \to [0, \infty)$.
- Пример. Евклидово расстояние и его обобщение:

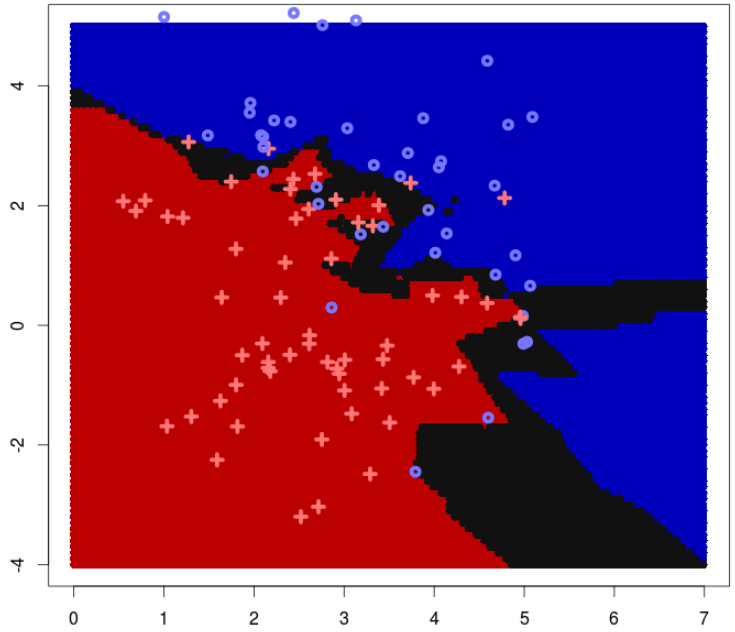
$$\rho(x, x_i) = \left(\sum_{k=1}^{n} \left| x^{(k)} - x_i^{(k)} \right|^2 \right)^{\frac{1}{2}} \qquad \rho(x, x_i) = \left(\sum_{k=1}^{n} \beta_k \left| x^{(k)} - x_i^{(k)} \right|^p \right)^{\frac{1}{p}}$$

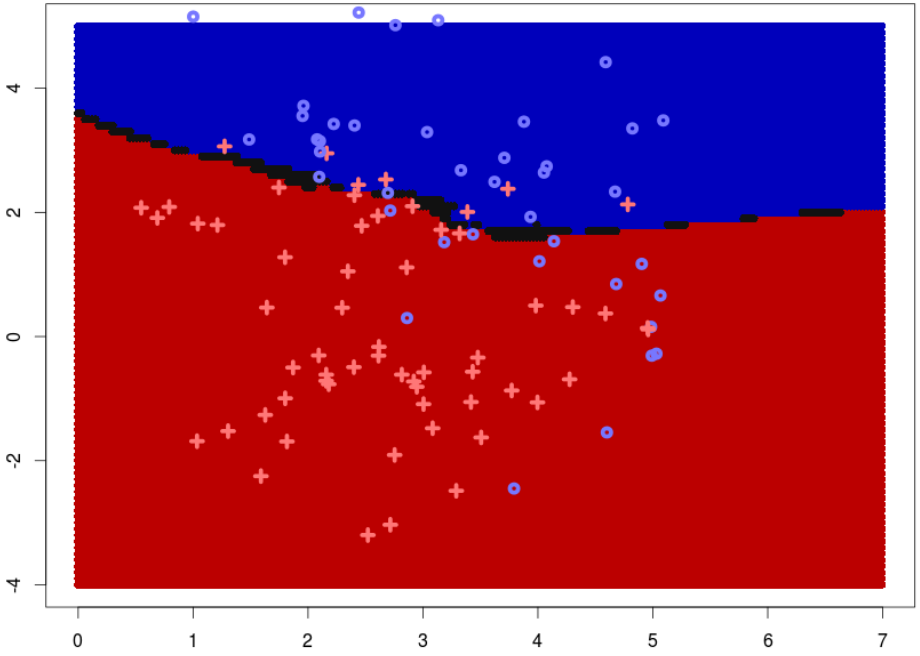
Lazy learning

- Это так называемое ленивое обучение, в котором нет этапа тренировки параметров модели. Сразу происходит этап предсказания.
- Подходит для задач, в которых сложно сформулировать набор признаков, но легко сравнивать объекты (пример: сравнительная геномика)
- Недостаток: медленный процесс предсказания

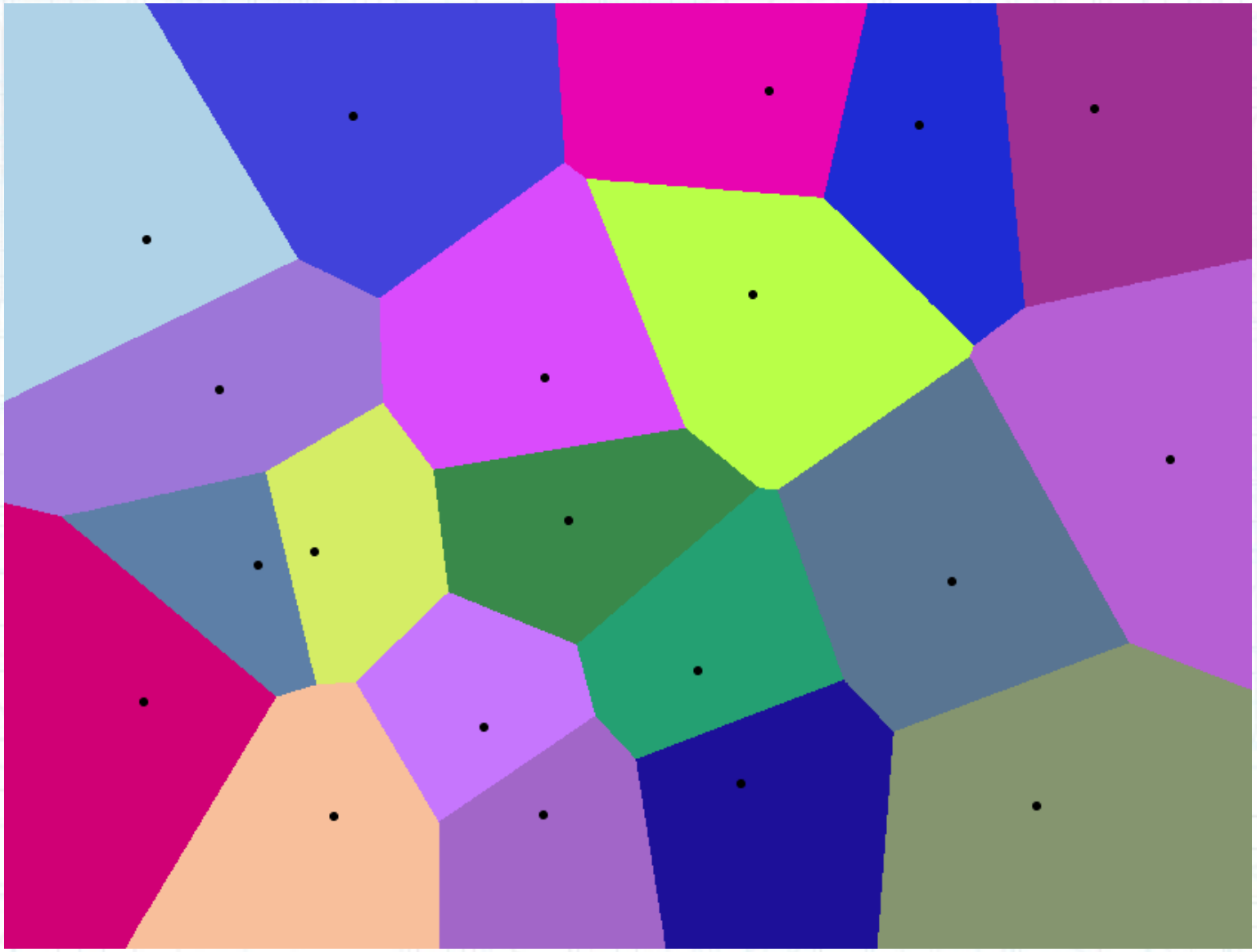
Методы 1-го, 4-х, 60-и ближайших соседей







Диаграммы Вороного



Метод окна Парзена

Вес соседей w задается с помощью неотрицательной невозрастающей функции K от расстояния до соседа. Сумма весов соседей класса трактуется как вероятность этого класса.

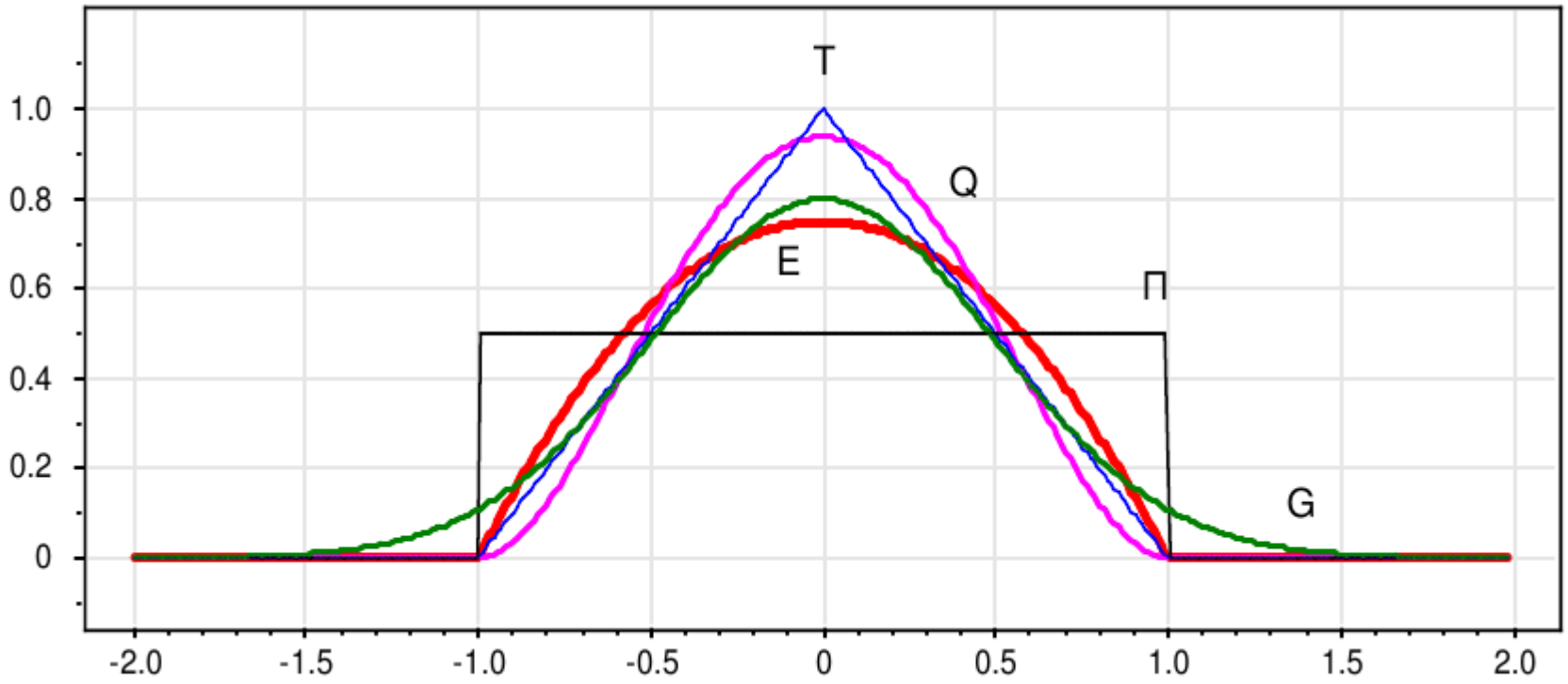
$$w(i,x) = K\left(\frac{\rho(x,x^{(i)})}{h}\right), \text{ где } h \text{ — ширина окна,}$$

$K(r)$ — ядро, не возрастает и положительно на $[0,1]$

При фиксированной ширине окна качество классификатора сильно зависит от плотности точек.

Выход: положить ширину h равной расстоянию до k-того соседа

Часто используемые ядра



$П(r) = \big[|r| \leqslant 1\big]$ — прямоугольное

$T(r) = \big(1 - |r|\big)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — треугольное

$E(r) = \big(1 - r^2\big)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квадратичное (Епанечникова)

$Q(r) = \big(1 - r^2\big)^2\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квартическое

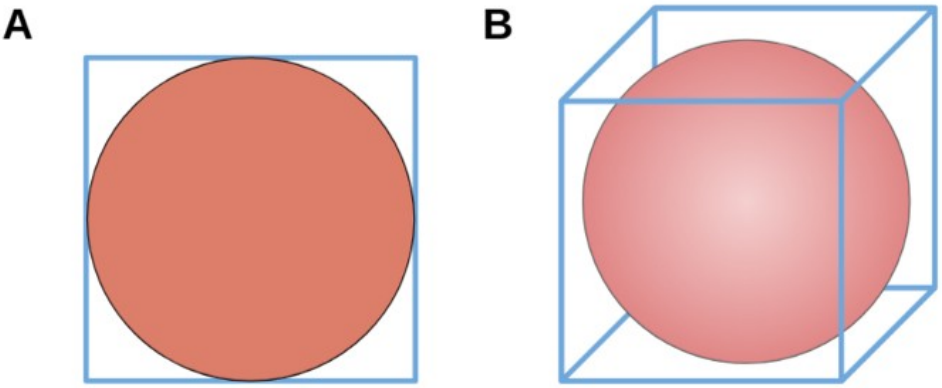
$G(r) = \exp\big(-2r^2\big)$ — гауссовское

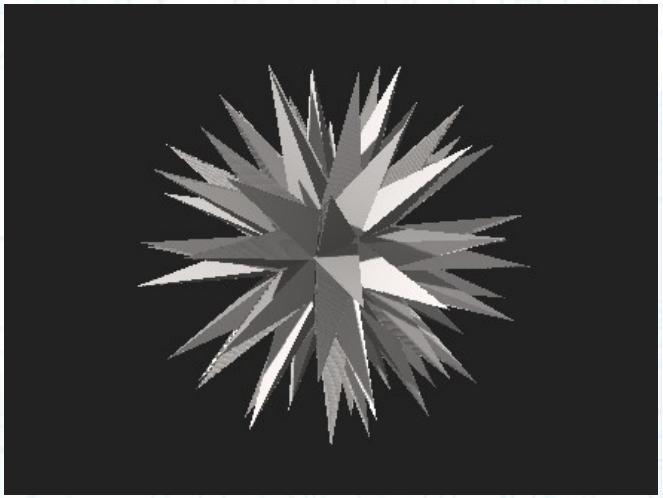
Проклятие размерности

- Проклятие размерности - усреднение значений метрики при большом количестве признаков. Почти до всех ближайших соседей расстояние одинаково
- Почему это происходит:
  - Шар радиуса R имеет объем $V(R) \sim R^D$
  - Объем шара радиуса 0.9 в 20-мерном пространстве составляет всего 12% от объема шара радиуса 1.
    Т.е. 88% точек лежит на сфере: 0.9<R<1

$$\frac{V(R-\varepsilon)}{V(R)} = \left(\frac{R-\varepsilon}{R}\right)^D \xrightarrow{D\to\infty} 0$$

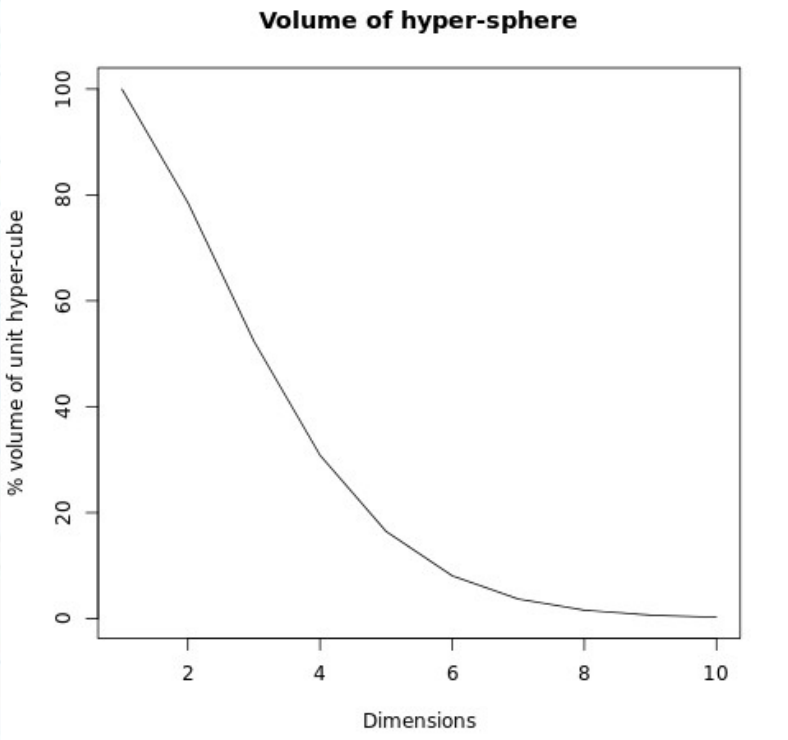
Проклятие размерности





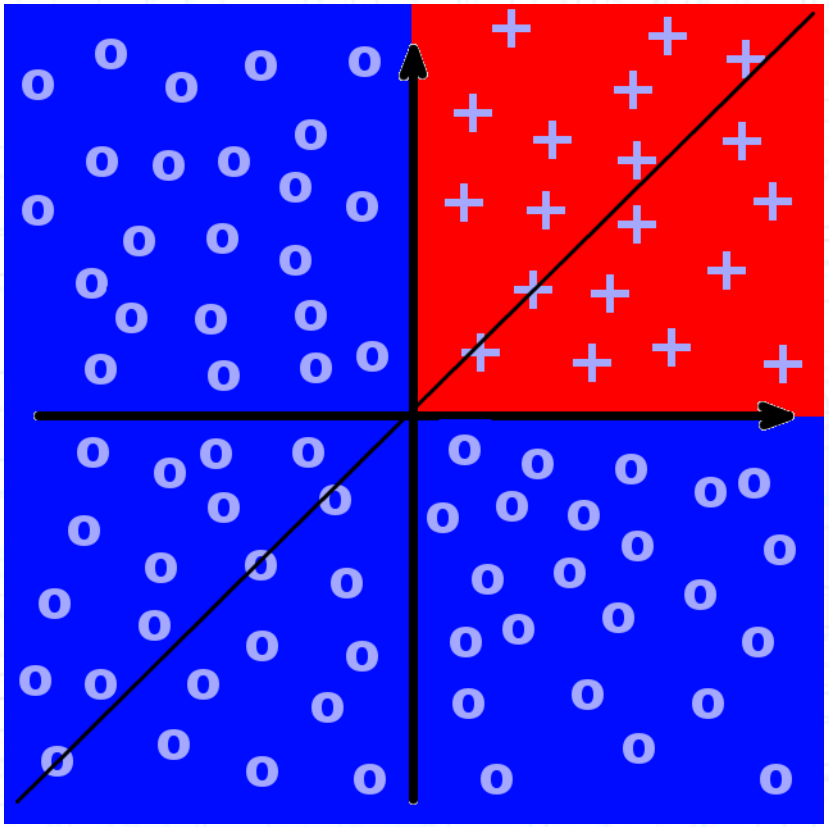
Объем вписанной в куб сферы в многомерном пространстве во много раз меньше объема куба!

Расстояние до вершины куба: $\sqrt{n}$. Количество вершин: 2^n



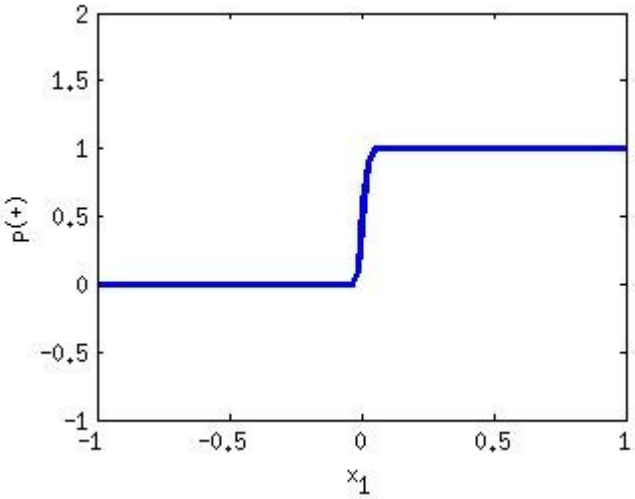
Проклятие размерности
Пример

- Пространство признаков: R^n.
- Класс +: область $x_{1,2}>0$ (остальные координаты произвольны)
- X_ℓ - равномерно распределена

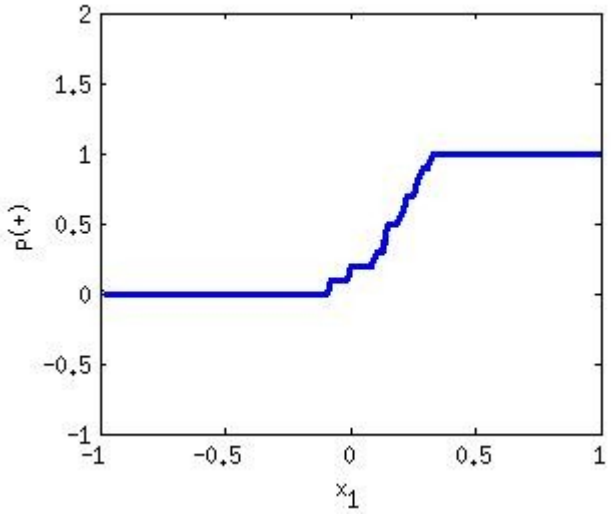


Проклятие размерности
Пример

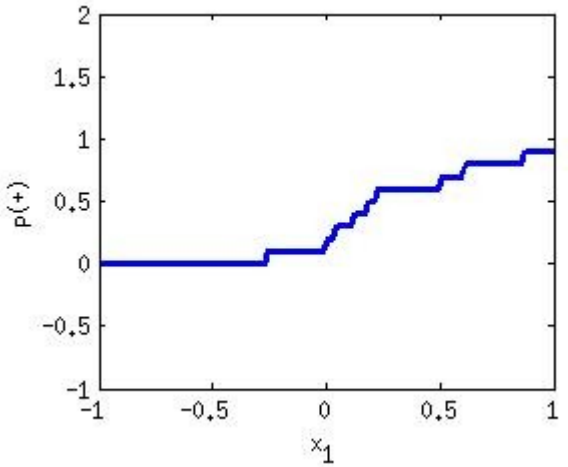
- Метод 10 ближайших соседей. ℓ = 10000
- Относительная частота класса “+” на прямой: $x_1=x_2$, $x_3=0$, $x_4=0$,...



n=2



n=5



n=20

Вывод: для больших размерностей
метрические алгоритмы сглаживают границы областей классов

Жадное добавление признаков

1) Вдруг одного признака достаточно?
   Расстояние по k-му признаку: $\rho(x, x_i) = \left| x^{(k)} - x_i^{(k)} \right|$
   Выберем наилучший признак: $LOO(k) \to \min_k$

2)Добавим еще один признак k:

$$\rho^p(x, x_i) := \rho^p(x, x_i) + \beta_k \left| x^{(k)} - x_i^{(k)} \right|^p$$

Найдем лучший k и коэффициент $\beta_к$

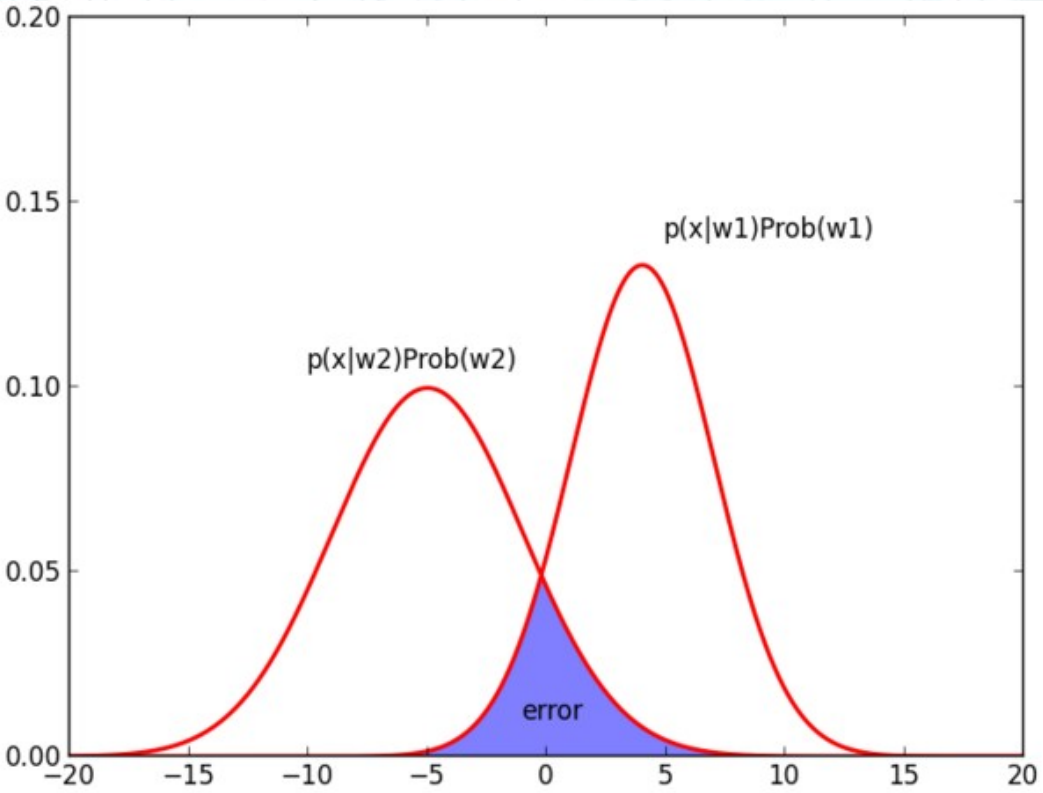
$$LOO(k, \beta_k) \to \min_{k, \beta_k}$$

3) Будем добавлять признаки, пока LOO уменьшается

Выбор метрики – сложная задача

- Юриспруденция: поиск похожих случаев из судебной практики
- Медицина: как сказывалось то или иное лечение на пациентах с похожими симптомами?
- Оценка стоимости: найти похожие квартиры/подержанную технику/драгоценности и вычислить среднюю стоимость
- Геномика: найти общие признаки генных последовательностей, отвечающие за диагноз

Вероятностный подход



Вероятностная постановка задачи

- P(x,y) – неизвестная точная плотность распределения на X×Y
- X^ℓ - выборка из случайных, независимых и одинаково распределенных прецедентов
- Найти: эмпирическую оценку плотности
- Классификатор с минимальной вероятностью ошибки:

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \mathrm{P}(y|x) = \arg\max_{y \in Y} P(y)p(x|y)$$

- Классификатор с минимальным средним риском:

$$a(x) = \arg\min_{s} E_y \mathscr{L}(s, y)$$

Decision function

- Предположим, что мы нашли вероятность p(y|x)=p(x,y)/p(x). Какое значение y нужно предсказать для заданного x ?
- Минимизация среднего риска:

$$a(x) = \arg\min_s E_y \mathscr{L}(s, y)$$

- Упражнение:

y	2	3	4	5
p(y|x)	0.1	0.2	0.3	0.4

примите правильные решения a(x) для каждой функции потерь

- бинарная
- $\mathscr{L}(a(x), y^*(x)) = |a(x) - y^*(x)|$
- $\mathscr{L}(a(x), y^*(x)) = (a(x) - y^*(x))^2$

Вероятностные подходы

- Фреквентистский — оценка вероятностного распределения данных:
  - дискриминативный подход, оценивает p(y|x) и строит разделяющую классы поверхность (пример: логистич. регр.)
  - генеративный, оценивает p(x|y) и применяет формулу Байеса
    - непараметрический $\hat{p}(x) = \sum^{\ell} w_i K\left(\frac{\rho(x, x_i)}{h}\right)$
    - параметрический $\hat{p}(x) = \varphi(x, \theta)$
- Байесовский — оценка случайных параметров модели, данные считаются неслучайными

Наивный байесовский классификатор

- Восстановление n одномерных плотностей — намного более простая задача, чем одной n-мерной.
- Допущение (наивное): признаки являются независимыми случайными величинами
- Тогда совместная плотность распределения представима в виде произведения частных плотностей:

$$p(x|y) = p_1(\xi_1|y) \cdots p_n(\xi_n|y), \quad x = (\xi_1, \ldots, \xi_n), \quad y \in Y.$$

Непараметрическая оценка

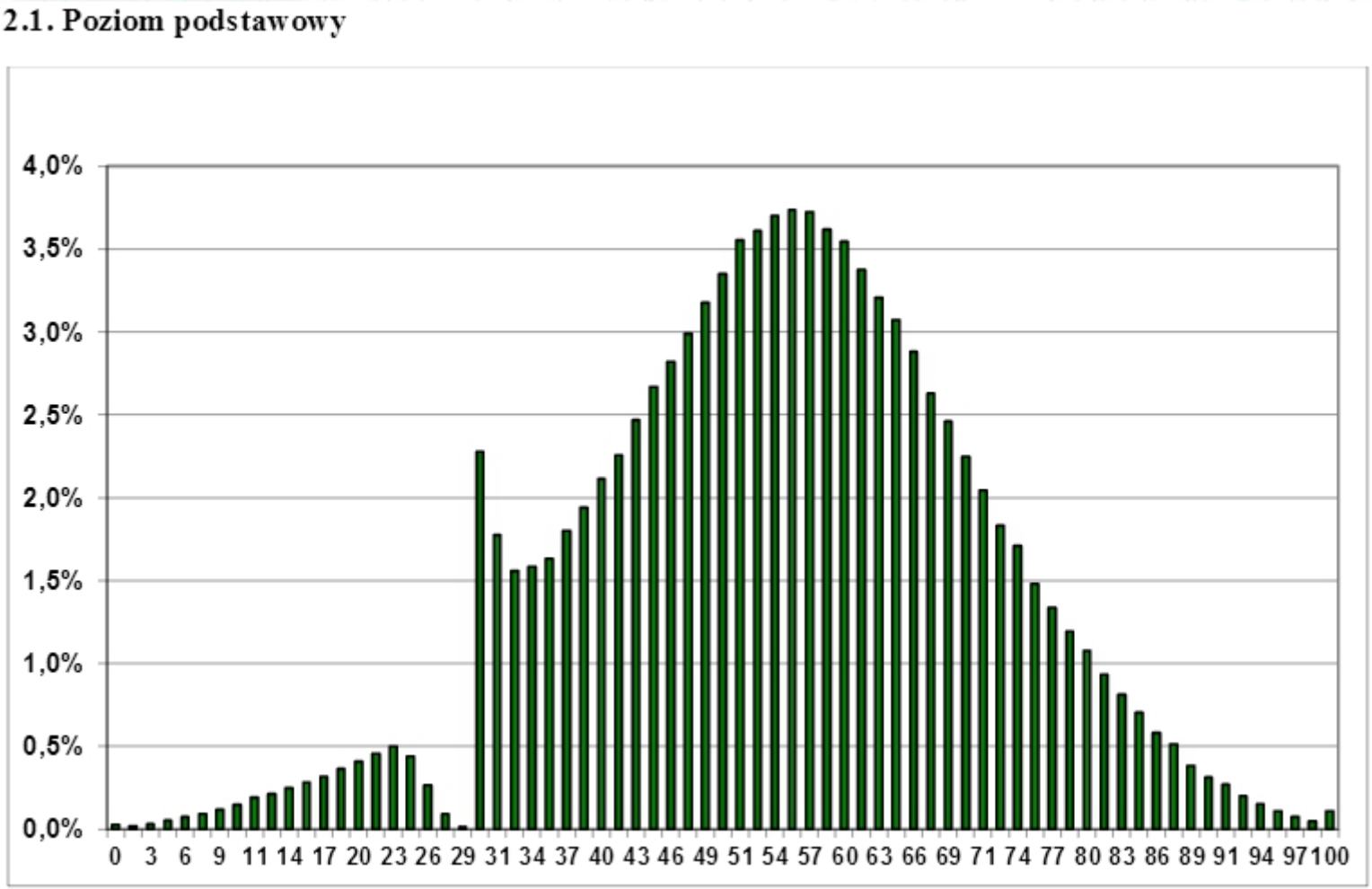
- Определение плотности вероятности (одномерный случай):

$$p(x) = \lim_{h \to 0} \frac{1}{2h} P[x - h, x + h]$$

- Эмпирическая оценка:

$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{2h} \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} [|x - x_i| < h]$$

Пример – гистограмма оценок



Пример – гистограмма возрастов (Россия 2012г)

Локальная непараметрическая оценка Парзена-Розенблатта

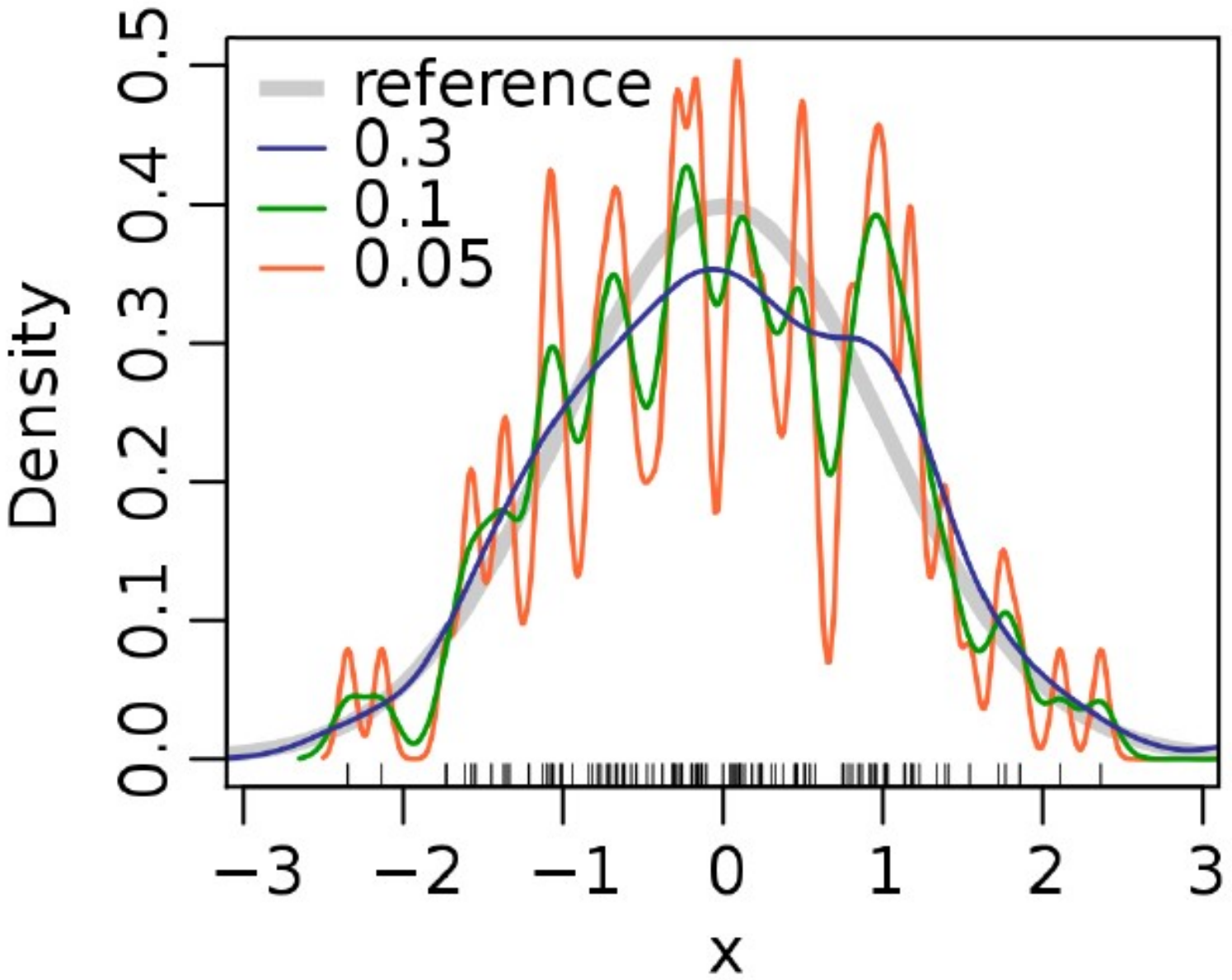
$$\hat{p}_h(x) = \frac{1}{\ell\, h} \sum_{i=1}^{\ell} K\left(\frac{x - x_i}{h}\right)$$

K(z) — функция, называемая ядром, чётная и нормированная:

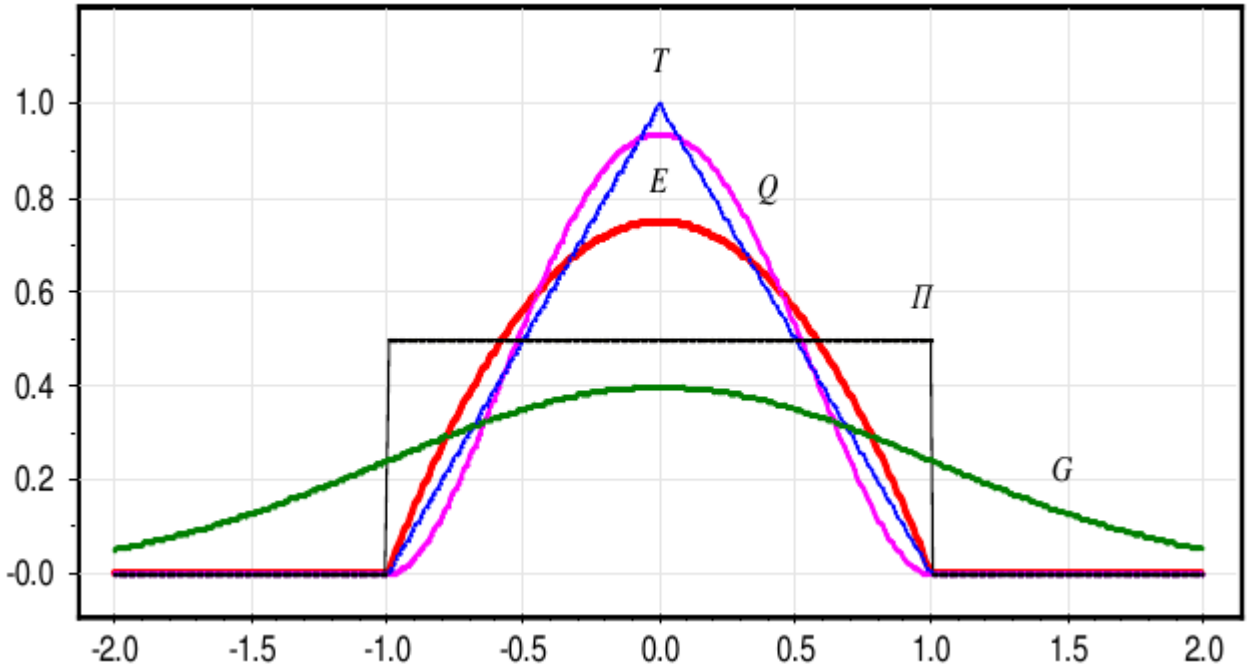
$$\int K(z)\, dz = 1$$

$\hat{p}_h$ сходится к p при $h \to 0$, $\ell \to \infty$, $h\ell \to \infty$

Зависимость от h



Выбор ядра



$E(r) = \frac{3}{4}(1 - r^2)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — оптимальное (Епанечникова);

$Q(r) = \frac{15}{16}(1 - r^2)^2\big[|r| \leqslant 1\big]$ — квартическое;

$T(r) = \big(1 - |r|\big)\big[|r| \leqslant 1\big]$ — треугольное;

$G(r) = (2\pi)^{-1/2}\exp(-\frac{1}{2}r^2)$ — гауссовское;

$\Pi(r) = \frac{1}{2}\big[|r| \leqslant 1\big]$ — прямоугольное.

Параметрическая оценка плотности

$$p(x) = \varphi(x;\theta)$$

- Принцип максимума правдоподобия:

$$L(\theta; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \ln \varphi(x_i;\theta) \to \max_\theta$$

- Необходимое условие оптимума:

$$\frac{\partial}{\partial\theta} L(\theta; X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \frac{\partial}{\partial\theta} \ln \varphi(x_i;\theta) = 0$$

Многомерное нормальное распределение

$$a(x) = \arg\max_{y \in Y} \mathrm{P}(y|x) = \arg\max_{y \in Y} P(y)p(x|y)$$

$$p(x|y) = \mathcal{N}(x; \mu_y, \Sigma_y) = \frac{e^{-\frac{1}{2}(x-\mu_y)^\intercal \Sigma_y^{-1}(x-\mu_y)}}{\sqrt{(2\pi)^n \det \Sigma_y}}$$

где $\mu_y \in \mathbb{R}^n$ — вектор матожидания (центр) класса $y \in Y$
$\Sigma_y \in \mathbb{R}^{n \times n}$ — ковариационная матрица класса $y \in Y$

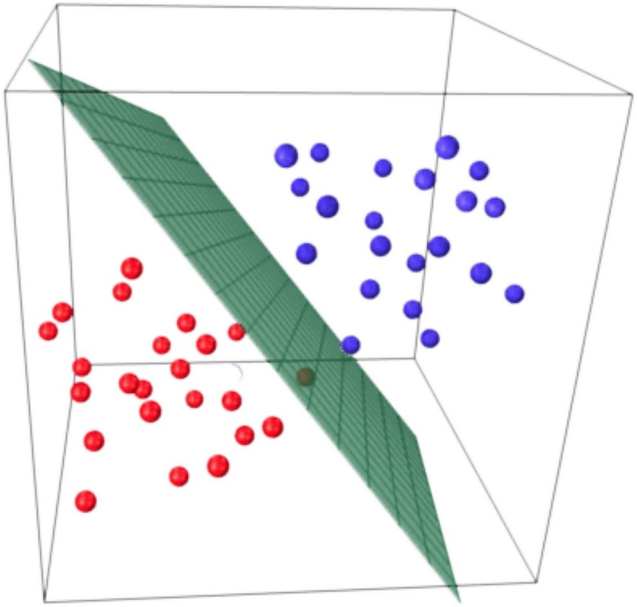
Принцип максимума правдоподобия:

$$L(\theta, X^\ell) = \prod_{i=1}^{\ell} \varphi(x_i, y_i, \theta) \to \max_\theta$$

Решение – подстановочный алгоритм:

$$\hat{\mu} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} x_i; \qquad \hat{\Sigma} = \frac{1}{\ell} \sum_{i=1}^{\ell} (x_i - \hat{\mu})(x_i - \hat{\mu})^\intercal$$

Логистическая регрессия

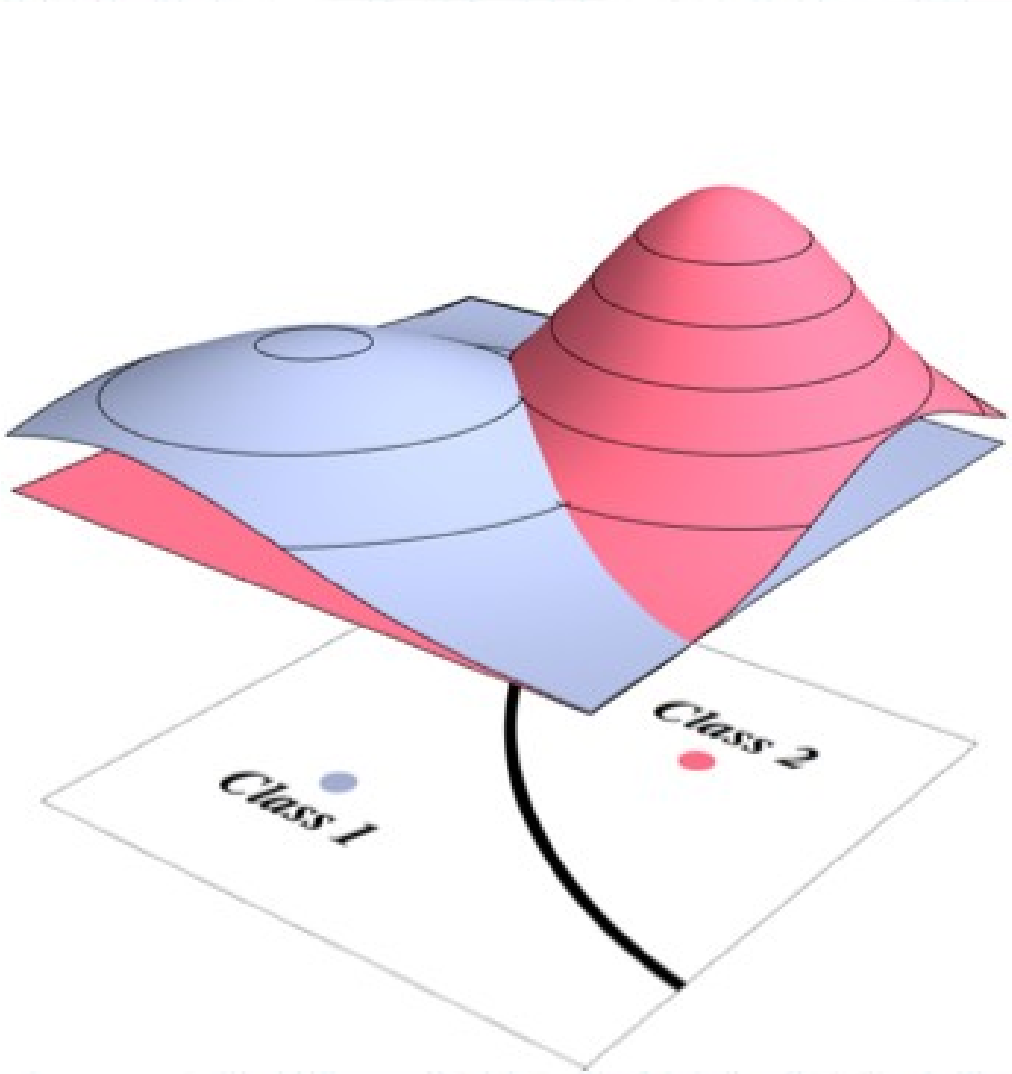


Если плотности вероятностей объектов в каждом классе распределены по нормальному закону с одинаковой ковариационной матрицей, но разными матожиданиями, то разделяющая классы поверхность является плоскостью, а вероятности равны логистической функции от отклонения точек от плоскости

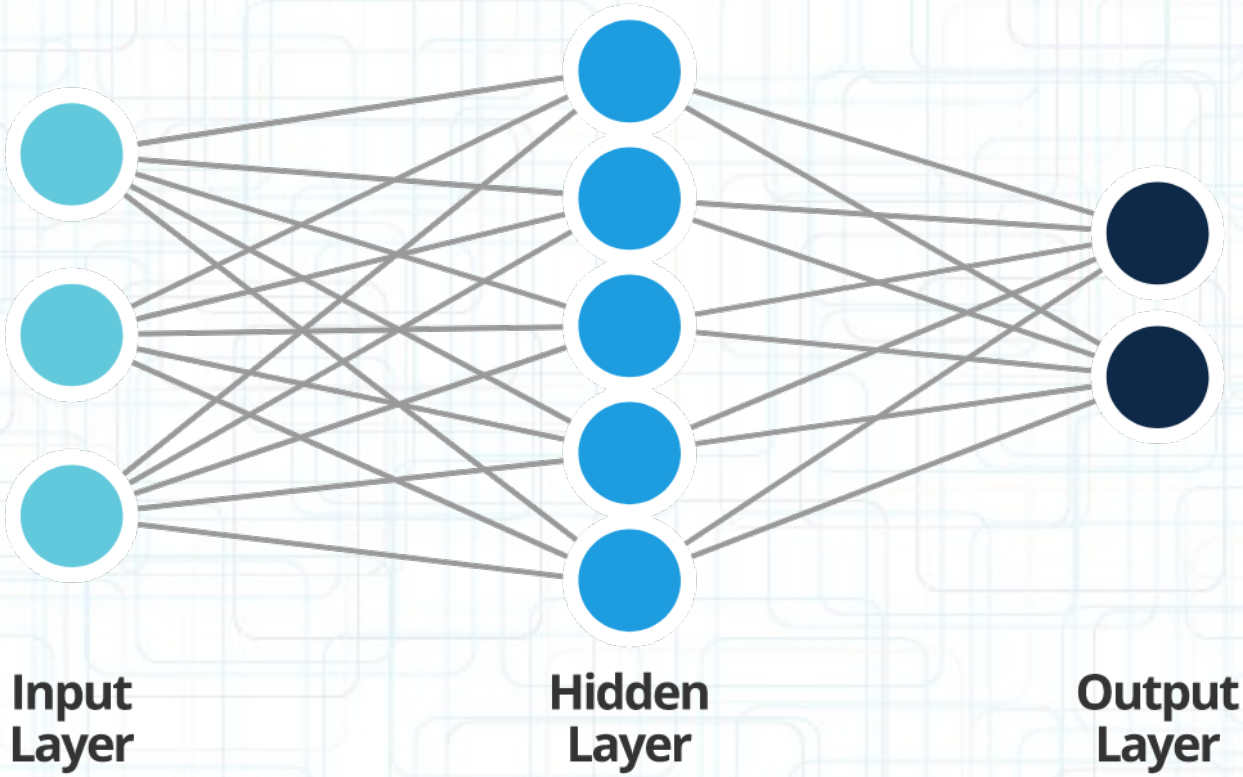
$$a(x) = \operatorname{sign}\big(\langle w, x\rangle - w_0\big)$$

$$\mathsf{P}(y|x) = \sigma\big(\langle w, x\rangle\, y\big) \qquad \sigma(z) = \frac{1}{1+e^{-z}}$$

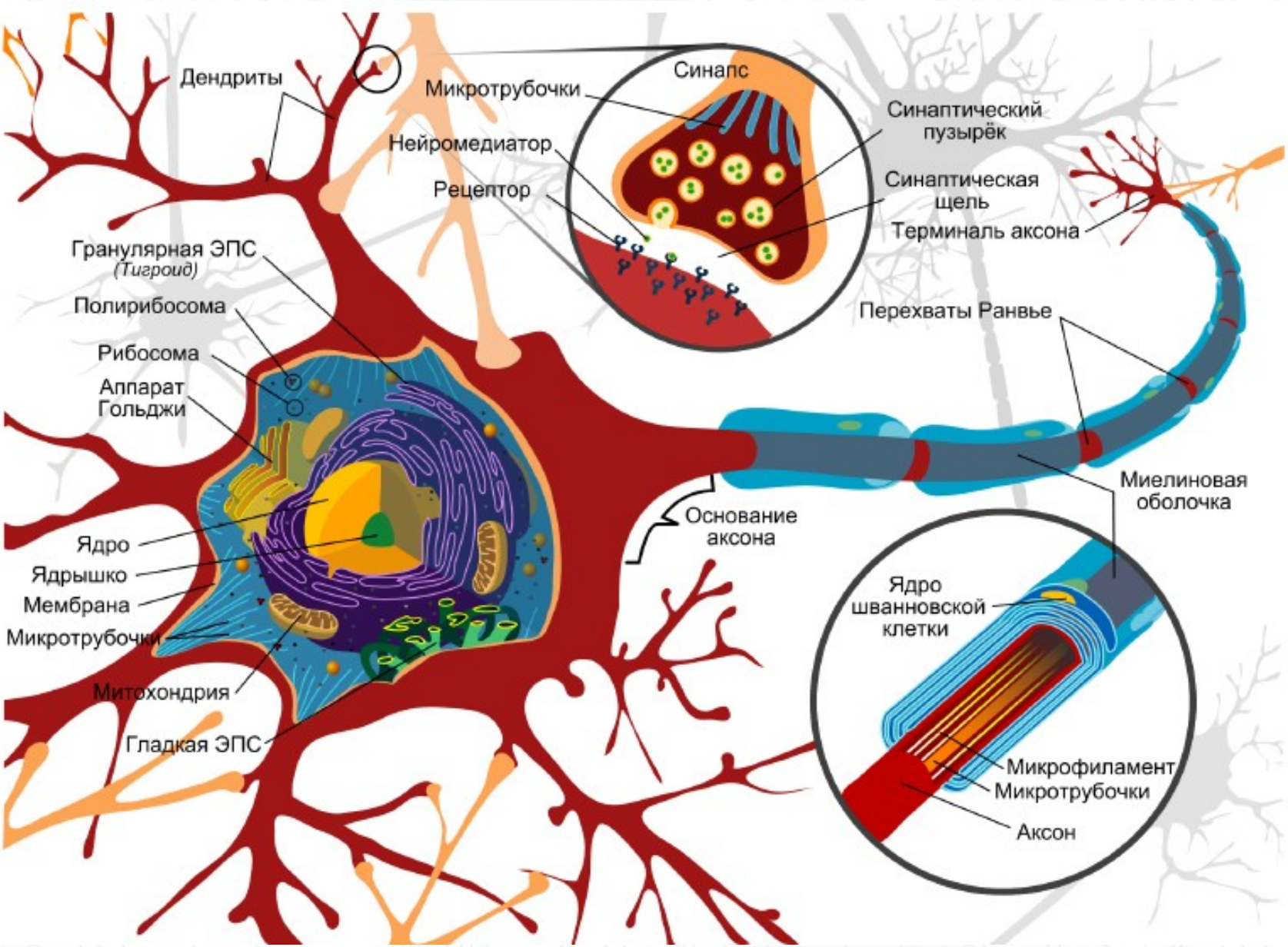
Разные дисперсии приводят к нелинейной разделяющей классы поверхности



Нейросетевые алгоритмы

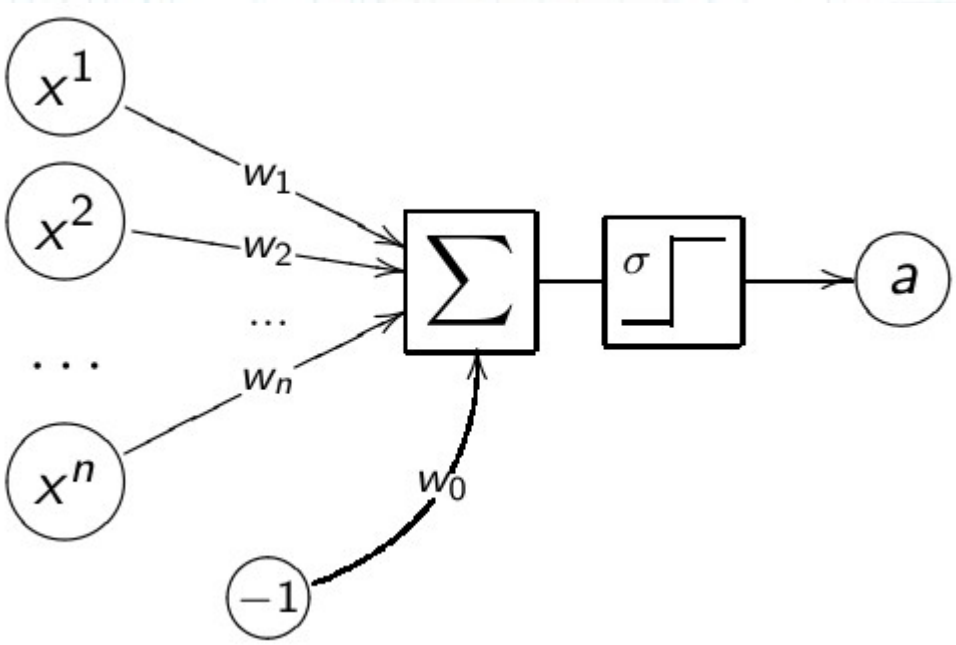


Модель нейрона



Линейная модель нейрона МакКаллока-Питтса (1943)

$$a(x, w) = \sigma(\langle w, x \rangle) = \sigma\left(\sum_{j=1}^{n} w_j f_j(x) - w_0 \right)$$



Градиентный метод численной минимизации

Минимизация эмпирического риска:

$$Q(w) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}\big(g(w, x_i), y_i\big) = \sum_{i=1}^{\ell} \mathscr{L}_i(w) \to \min_w .$$

Численная минимизация методом *градиентного спуска*:

$$w^{(0)} := \text{начальное приближение;}$$

$$w^{(t+1)} := w^{(t)} - h \cdot \nabla Q(w^{(t)}), \qquad \nabla Q(w) = \left(\frac{\partial Q(w)}{\partial w_j}\right)_{j=0}^{n},$$

где h — *градиентный шаг*, называемый также *темпом обучения*.

$$w^{(t+1)} := w^{(t)} - h \sum_{i=1}^{\ell} \nabla \mathscr{L}_i\big(w^{(t)}\big).$$

Идея ускорения сходимости:

брать (x_i, y_i) по одному и сразу обновлять вектор весов.

Достоинства и недостатки

Достоинства:

1. легко реализуется;
2. легко обобщается на любые $g(x, w)$, $\mathscr{L}(a, y)$;
3. возможно динамическое (потоковое) обучение;
4. на сверхбольших выборках можно получить неплохое решение, даже не обработав все (x_i, y_i);
5. всё чаще применяется для Big Data

Недостатки:

1. возможна расходимость или медленная сходимость;
2. застревание в локальных минимумах;
3. подбор комплекса эвристик является искусством;
4. проблема переобучения;

Многомерная линейная регрессия

- $f_1(x), \ldots, f_n(x)$ — числовые признаки;
- Модель:

$$f(x,\alpha) = \sum_{j=1}^{n} \alpha_j f_j(x), \qquad \alpha \in \mathbb{R}^n$$

- Матричная форма:

$$\underset{\ell\times n}{F} = \begin{pmatrix} f_1(x_1) & \ldots & f_n(x_1) \\ \ldots & \ldots & \ldots \\ f_1(x_\ell) & \ldots & f_n(x_\ell) \end{pmatrix}, \quad \underset{\ell\times 1}{y} = \begin{pmatrix} y_1 \\ \ldots \\ y_\ell \end{pmatrix}, \quad \underset{n\times 1}{\alpha} = \begin{pmatrix} \alpha_1 \\ \ldots \\ \alpha_n \end{pmatrix}$$

$$Q(\alpha, X^\ell) = \sum_{i=1}^{\ell} \big(f(x_i,\alpha) - y_i\big)^2 = \|F\alpha - y\|^2 \to \min_\alpha$$

Нормальная система уравнений

- Необходимое условие минимума

$$\frac{\partial Q}{\partial \alpha}(\alpha) = 2F^{\intercal}(F\alpha - y) = 0$$

$$F^{\intercal}F\alpha = F^{\intercal}y$$

- где $F^{\intercal}F$ — ковариационная матрица n×n набора признаков $f_1, \ldots, f_n$
- Решение системы: $\alpha^* = (F^{\intercal}F)^{-1}F^{\intercal}y = F^{+}y$
- Значение функционала: $Q(\alpha^*) = \|P_F y - y\|^2$
  где P_F - проекционная матрица

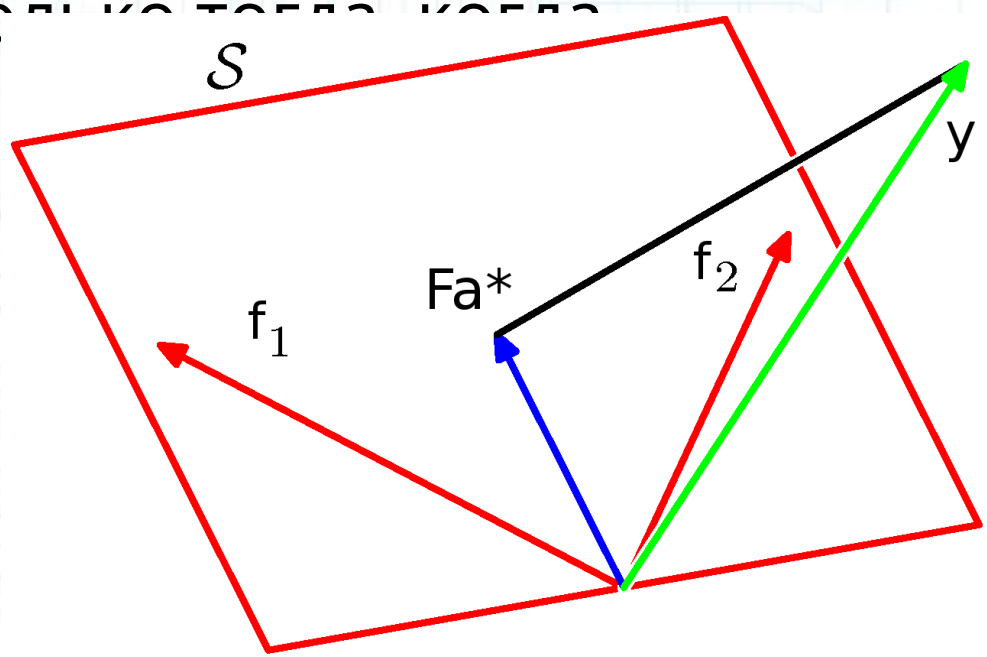
$$P_F = FF^{+} = F(F^{\intercal}F)^{-1}F^{\intercal}$$

Геометрический смысл

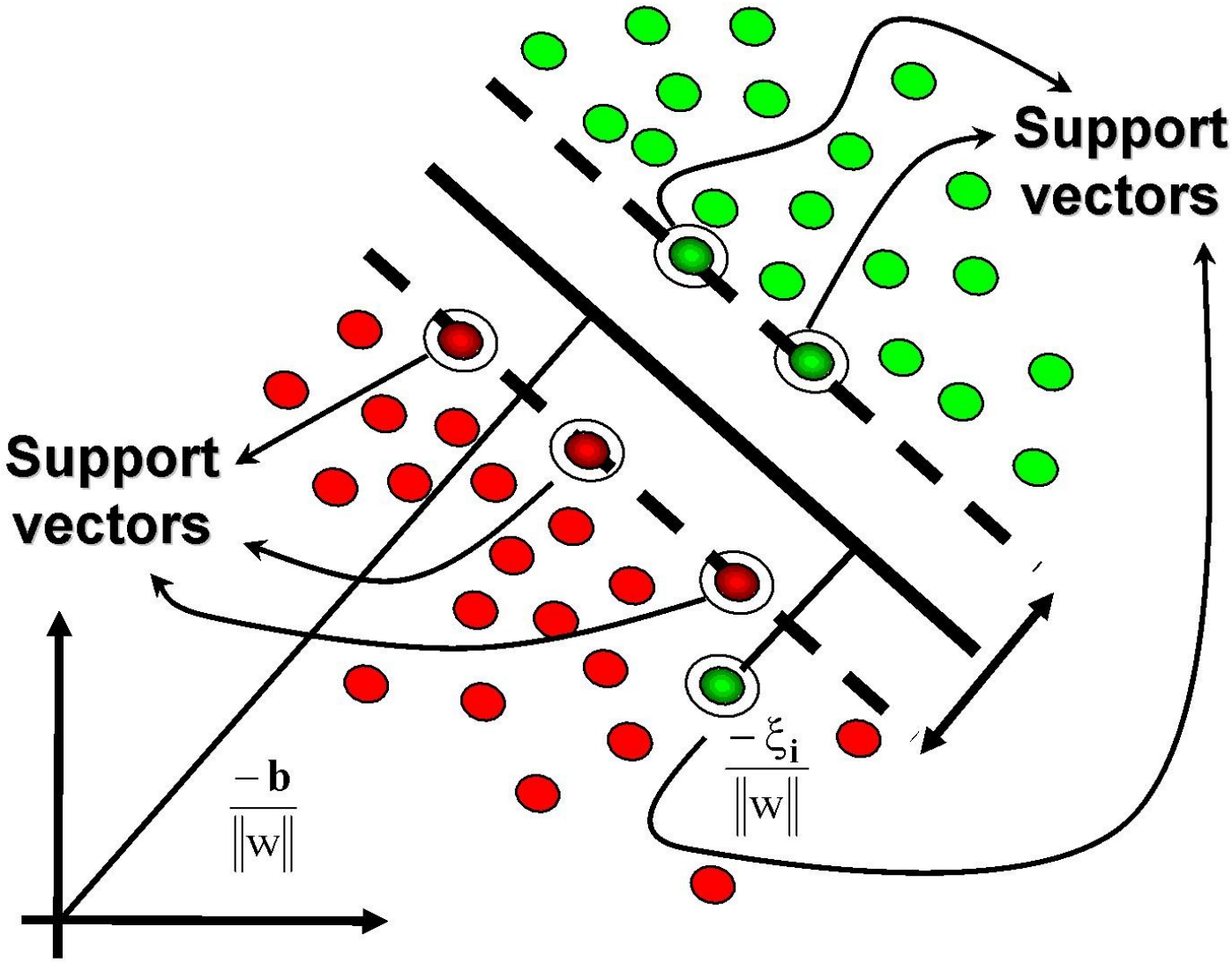
- Любой вектор вида y = Fα – линейная комбинация признаков

$$\|F\alpha - y\|^2 \to \min_{\alpha}$$

- Fα* – аппроксимация вектора y с наименьшим квадратом тогда и только тогда, когда Fα* - проекция y на подпространство признаков



Метод опорных векторов (SVM)



Самая широкая разделяющая полоса

- Рассмотрим линейный классификатор:

$$a(x, w) = \operatorname{sign}\big(\langle w, x\rangle - w_0\big)$$

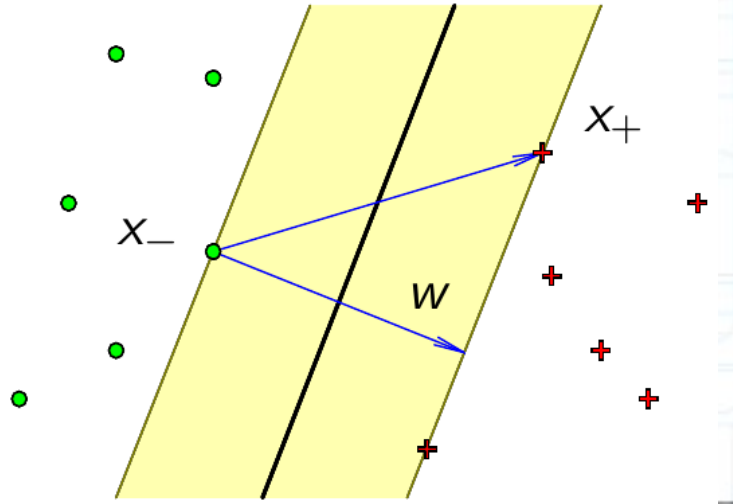
- Допустим, что обучающая выборка линейно разделима:

$$\exists w, w_0 : \quad M_i(w, w_0) = y_i\big(\langle w, x_i\rangle - w_0\big) > 0, \quad i = 1, \ldots, \ell$$

- w и w0 определены с точностью до множителя $\Rightarrow$ нормируем $\min\limits_{i=1,\ldots,\ell} M_i(w, w_0) = 1$

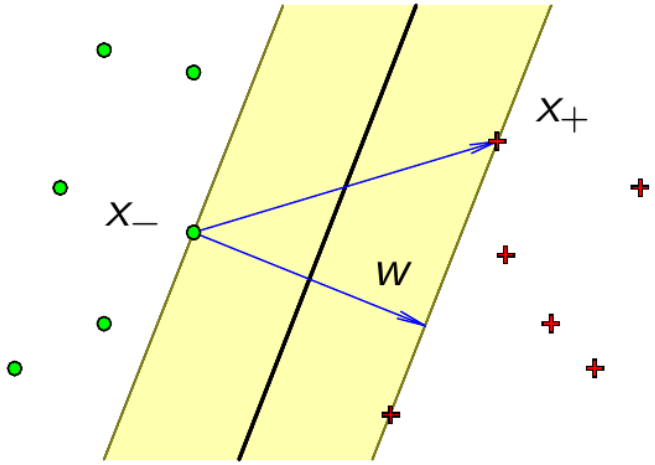
- Ширина полосы:

$$\frac{\langle x_+ - x_-, w\rangle}{\|w\|} = \frac{2}{\|w\|} \to \max$$



Метод опорных векторов для линейно разделимой выборки

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 \to \min\limits_{w,w_0}; \\ M_i(w,w_0) \geqslant 1, \quad i = 1,\ldots,\ell \end{cases}$$



Что делать, если выборка
не разделима гиперплоскостью?

Случай линейно неразделимой выборки

$$\begin{cases} \frac{1}{2}\|w\|^2 + C\sum_{i=1}^{\ell}\xi_i \to \min\limits_{w,w_0,\xi}; \\ M_i(w,w_0) \geqslant 1 - \xi_i, \quad i = 1,\ldots,\ell; \\ \xi_i \geqslant 0, \quad i = 1,\ldots,\ell. \end{cases}$$

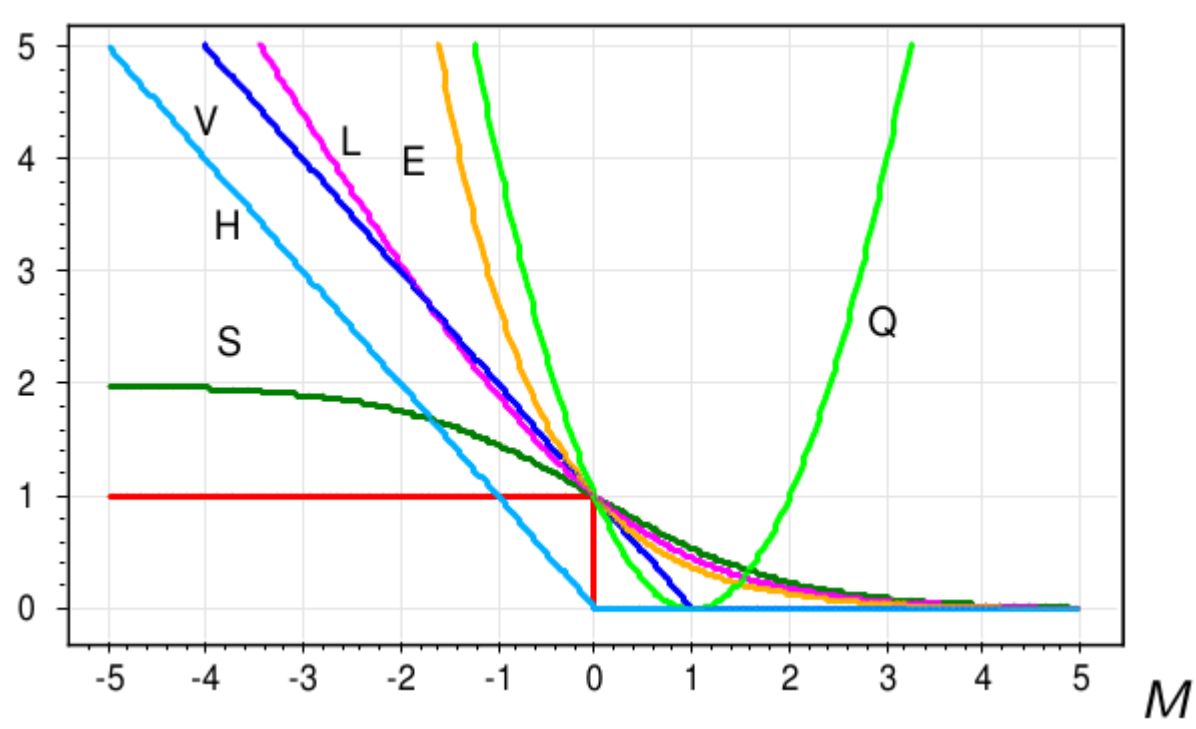
Так как $\xi_i \geqslant 0$ и $\xi_i \geqslant 1 - M_i$ **то в силу минимизации суммы** ξ_i

$$\xi_i = (1 - M_i)_+$$

Следовательно, наша задача эквивалентна минимизации функционала

$$Q(w,w_0) = \sum_{i=1}^{\ell}\big(1 - M_i(w,w_0)\big)_+ + \frac{1}{2C}\|w\|^2 \to \min_{w,w_0}$$

Часто используемые функции потерь



$V(M) = (1 - M)_+$ — кусочно-линейная (SVM);

$H(M) = (-M)_+$ — кусочно-линейная (Hebb's rule);

$L(M) = \log_2(1 + e^{-M})$ — логарифмическая (LR);

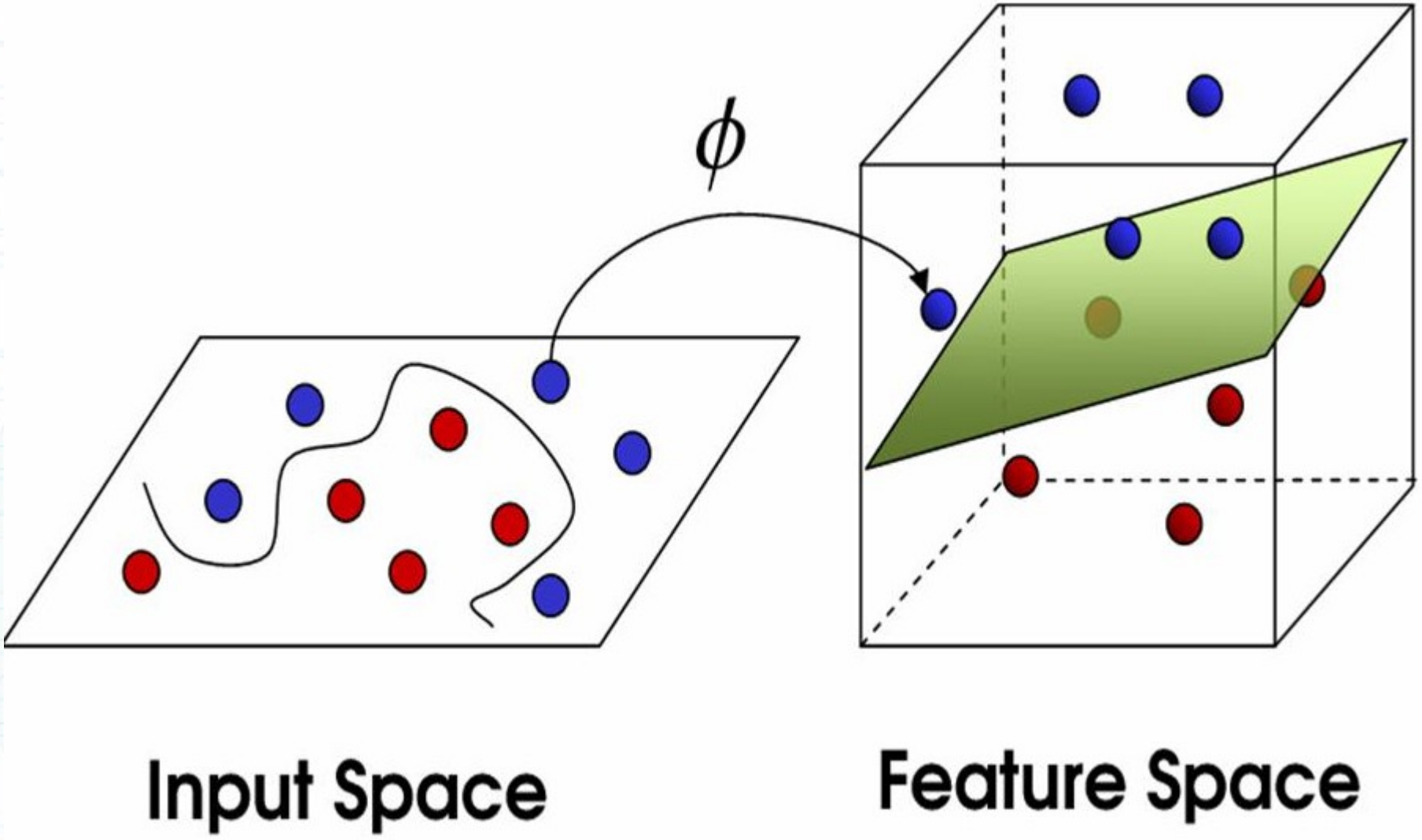
$Q(M) = (1 - M)^2$ — квадратичная (FLD);

$S(M) = 2(1 + e^M)^{-1}$ — сигмоидная (ANN);

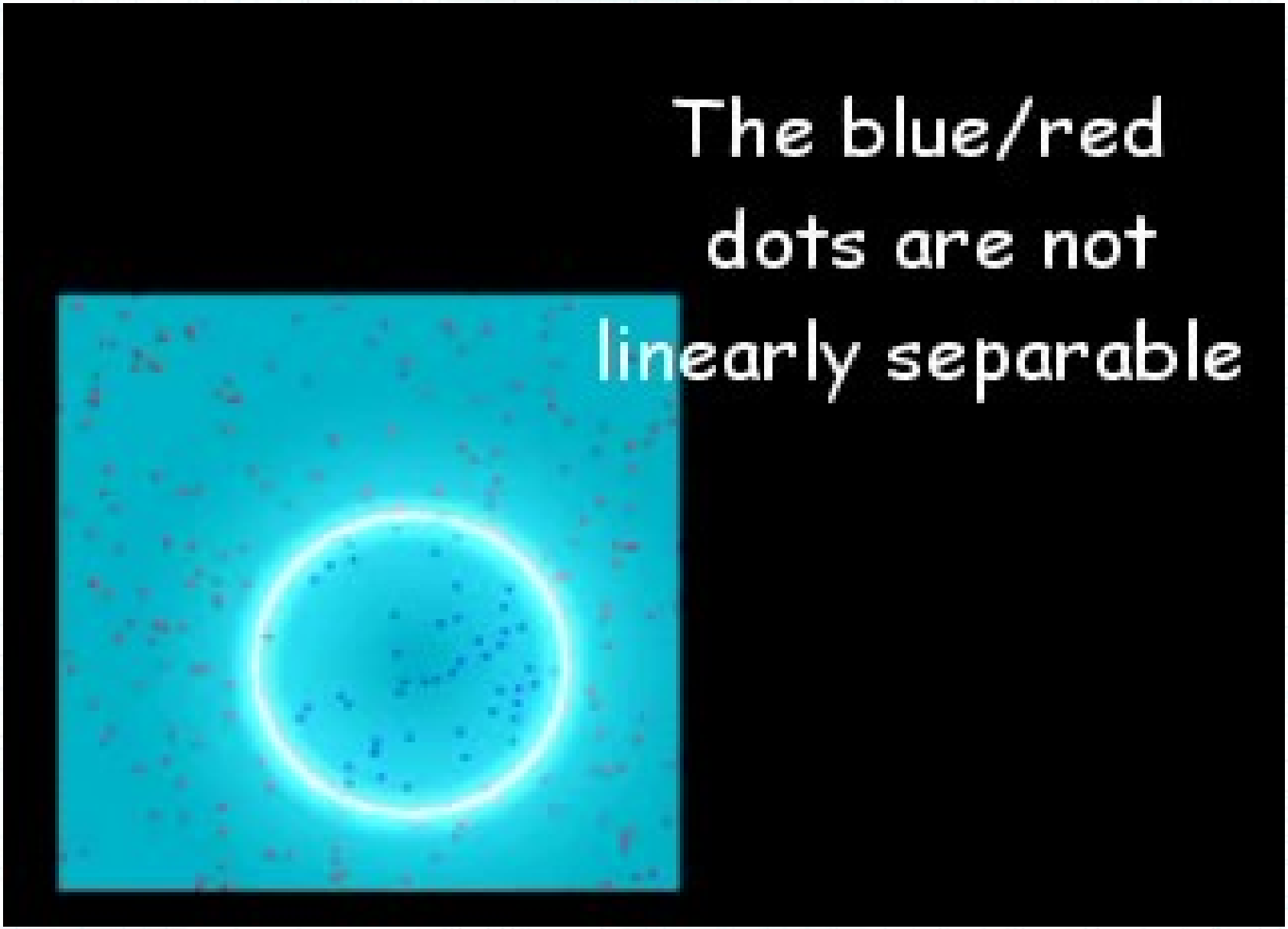
$E(M) = e^{-M}$ — экспоненциальная (AdaBoost);

$[M < 0]$ — пороговая функция потерь.

Нелинейное обобщение SVM
Расширение пространства



Видео-демонстрация



Полиномиальные ядра

Расширение пространства $\psi\colon (u_1, u_2) \mapsto \left(u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1 u_2\right)$

$$K(x, x') = \langle \psi(x), \psi(x') \rangle_H$$

Эквивалентно введению нового скалярного произведения в исходном пространстве:

$$\begin{aligned} K(u, v) = \langle u, v \rangle^2 &= \langle (u_1, u_2), (v_1, v_2) \rangle^2 = \\ &= (u_1 v_1 + u_2 v_2)^2 = u_1^2 v_1^2 + u_2^2 v_2^2 + 2u_1 v_1 u_2 v_2 = \\ &= \langle (u_1^2, u_2^2, \sqrt{2}u_1 u_2), (v_1^2, v_2^2, \sqrt{2}v_1 v_2) \rangle. \end{aligned}$$

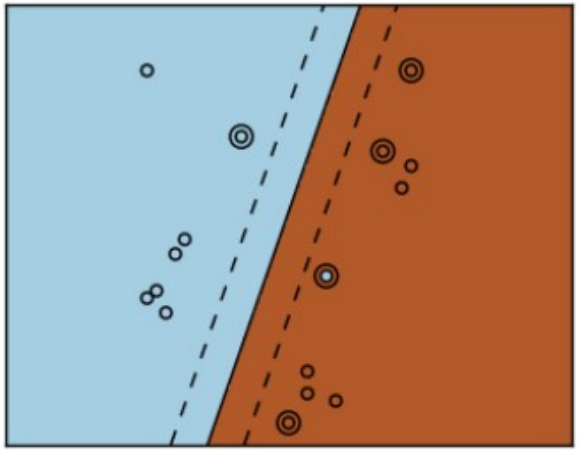
В общем случае новое скалярное произведение вводится формулой:

$$K(x, x') = \left(\langle x, x' \rangle + 1\right)^d$$

Примеры классификаций с различными ядрами

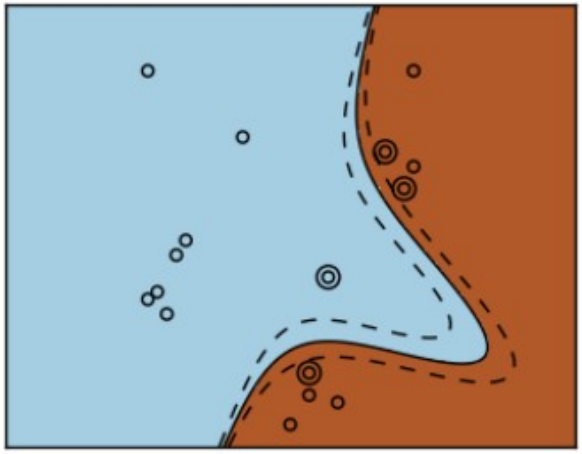
линейное

$\langle x, x' \rangle$



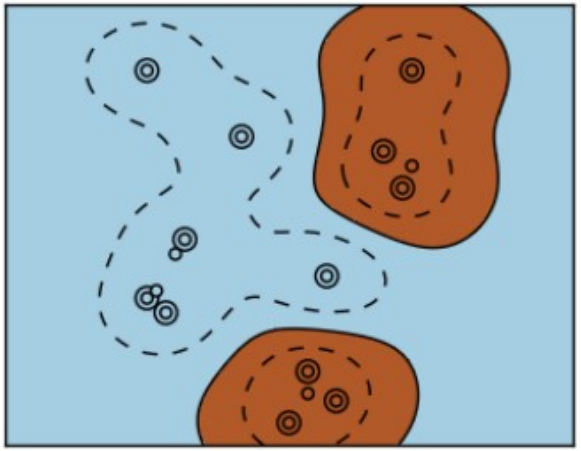
полиномиальное

$(\langle x, x' \rangle + 1)^d, \quad d=3$

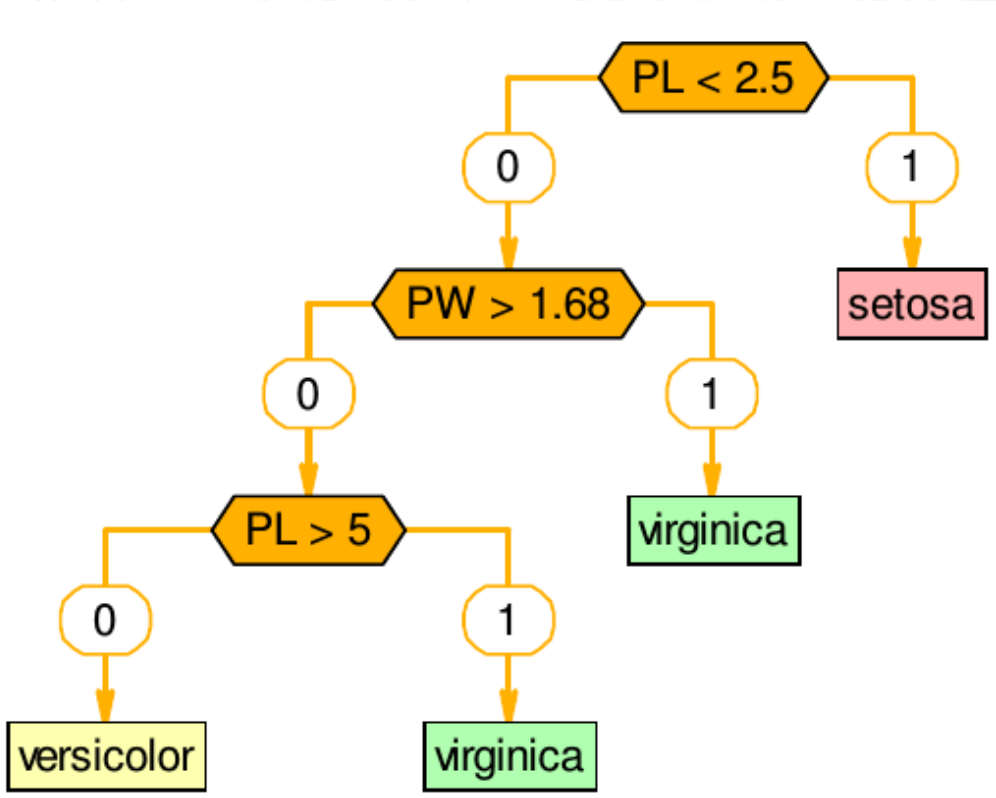


гауссовское (RBF)

$\exp(-\beta \|x - x'\|^2)$



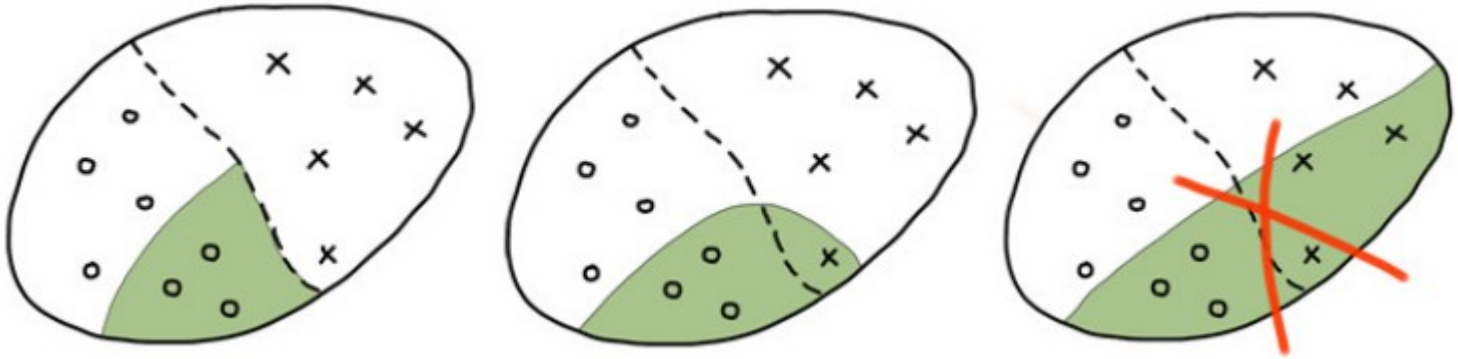
Логические алгоритмы



Понятие закономерности

- Предикат R: X → {0,1} – закономерность, если он выделяет (R(x)=1) достаточно много объектов одного класса C и практически не выделяет объектов других классов

$$p_c(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i=c\} \to \max;$$
$$n_c(R) = \#\{x_i : R(x_i)=1 \text{ и } y_i\neq c\} \to \min;$$



Точный тест Фишера

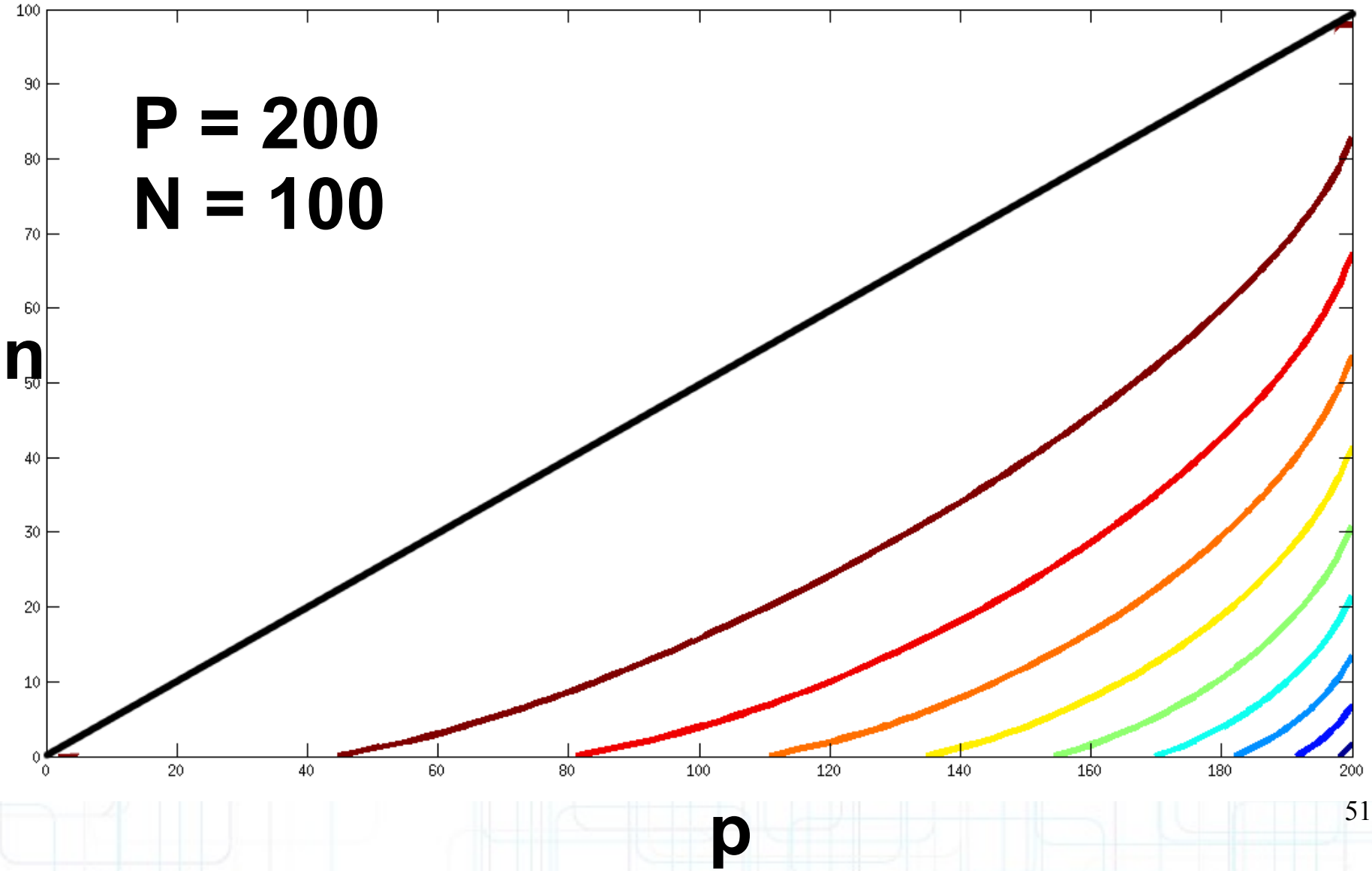
- Предположим, что события “объект отобран предикатом” и “объект имеет класс **c**” независимы
- Тогда вероятность отобрать p объектов класса **c** и n – других классов:

Точный тест Фишера

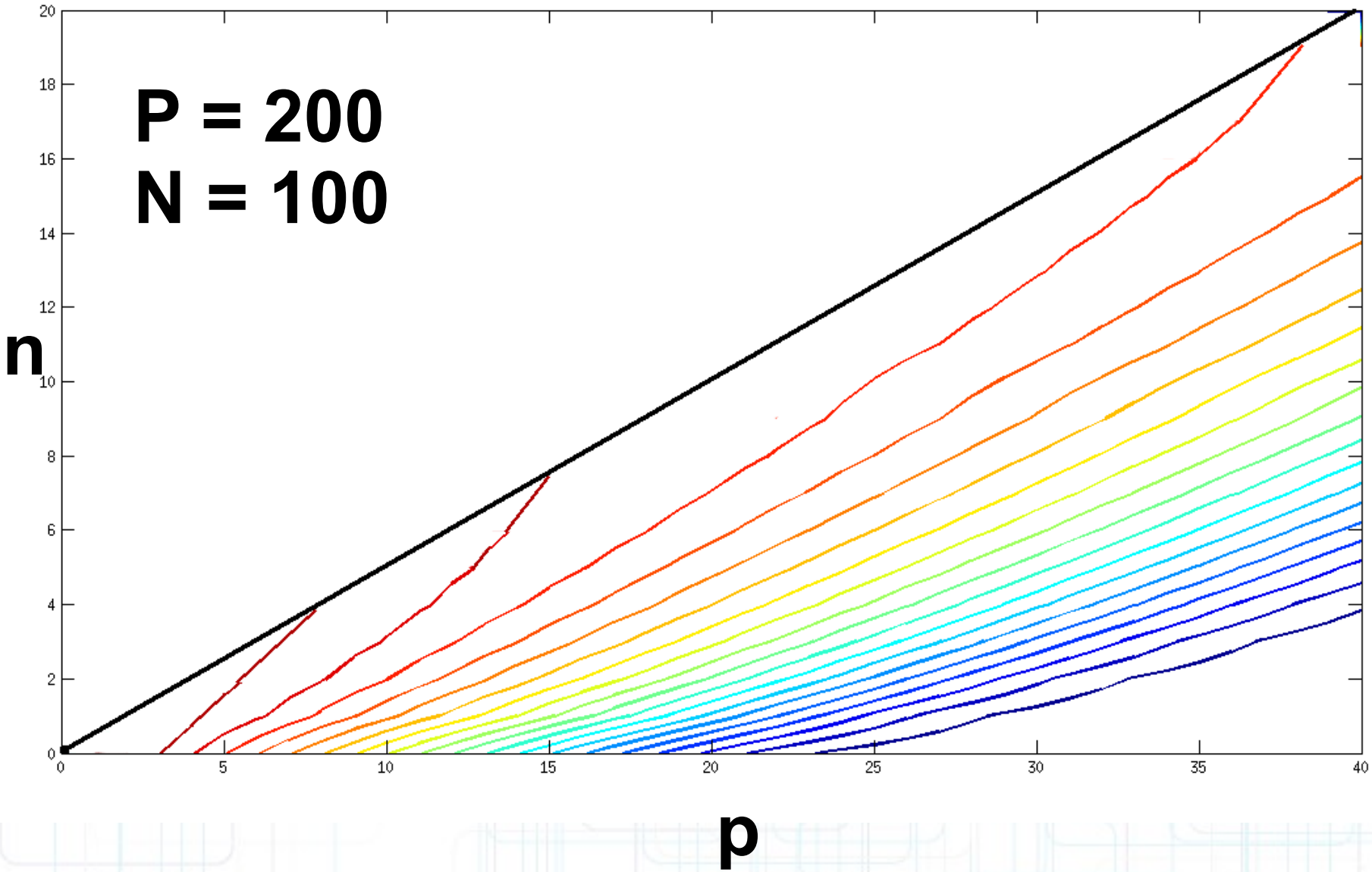
- Предположим, что события “объект отобран предикатом” и “объект имеет класс **c**” независимы
- Тогда вероятность отобрать p объектов класса **c** и n – других классов: $\frac{C_P^p C_N^n}{C_{P+N}^{p+n}}$
- Это правдоподобие гипотезы независимости событий. Чем меньше данная вероятность, тем более зависимы события

$$\mathrm{IStat}(p,n) = -\tfrac{1}{\ell}\log_2 \frac{C_P^p C_N^n}{C_{P+N}^{p+n}} \to \max$$

Линии уровня теста Фишера
Малые p и n



Линии уровня теста Фишера
Малые p и n



Энтропийный критерий информативности

Пусть ω_0, ω_1 — два исхода с вероятностями q и $1-q$.

Количество информации: $I_0 = -\log_2 q$, $I_1 = -\log_2(1-q)$.

Энтропия — математическое ожидание количества информации:

$$h(q) = -q\log_2 q - (1-q)\log_2(1-q).$$

Энтропия выборки X^ℓ, если исходы — это классы $y{=}c$, $y{\neq}c$:

$$H(y) = h\left(\frac{P}{\ell}\right).$$

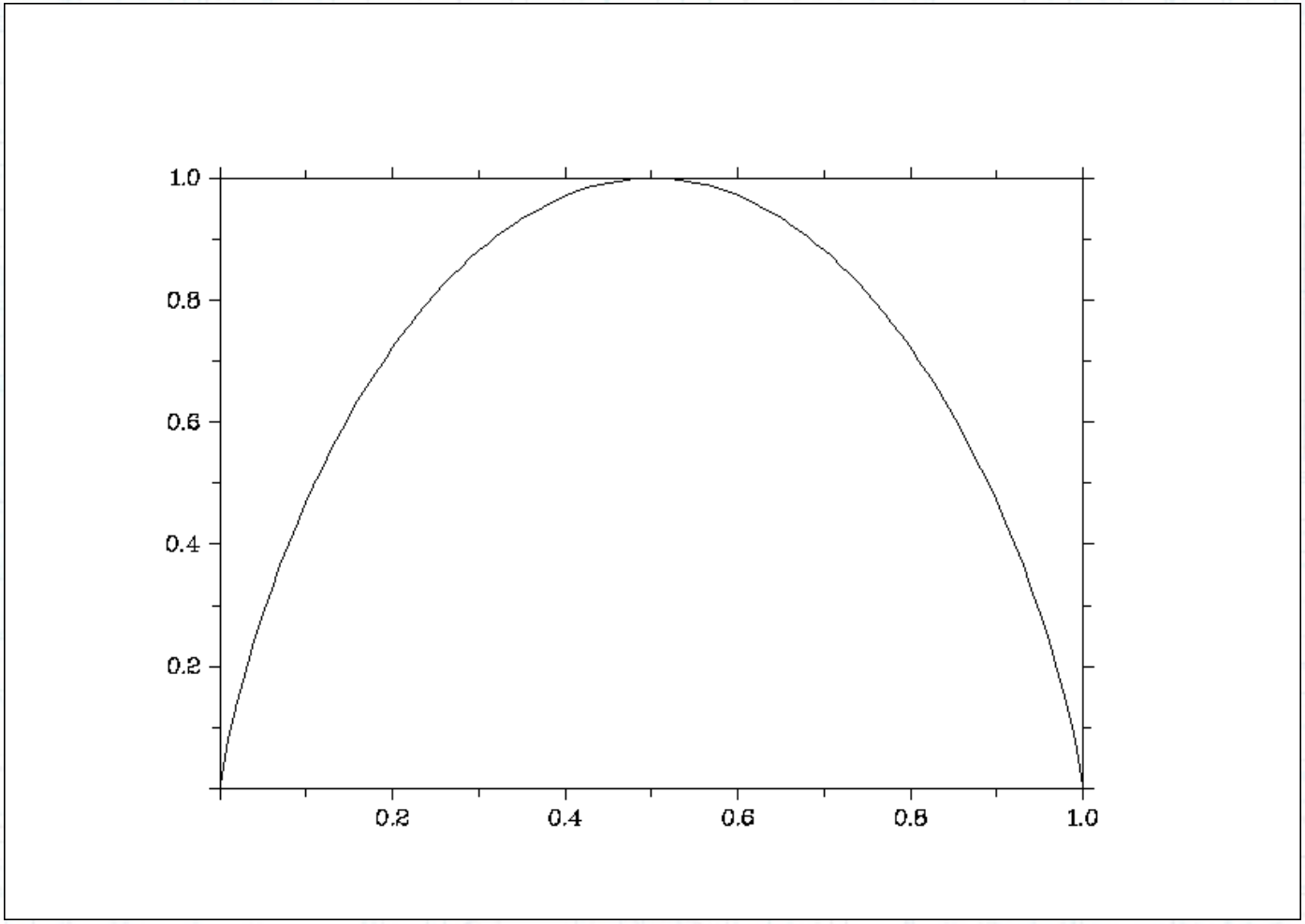
Энтропия выборки X^ℓ после получения информации $R(x_i)_{i=1}^{\ell}$:

$$H(y|R) = \frac{p+n}{\ell}h\left(\frac{p}{p+n}\right) + \frac{\ell-p-n}{\ell}h\left(\frac{P-p}{\ell-p-n}\right).$$

Прирост информации (Information gain, IGain):

$$\mathrm{IGain}(p,n) = H(y) - H(y|R).$$

Энтропия для различных q



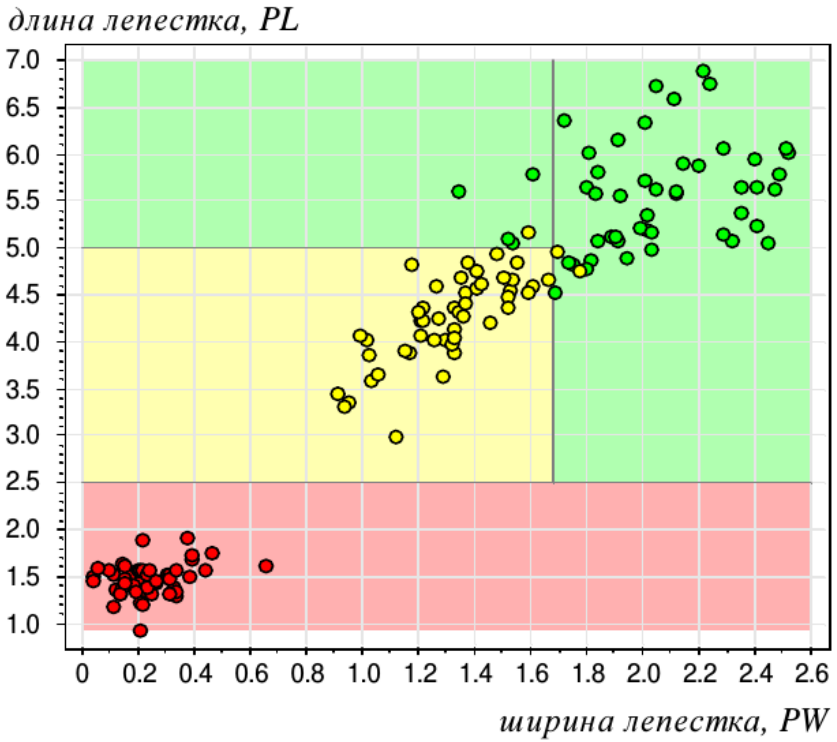
Соотношение статистического и энтропийного критериев

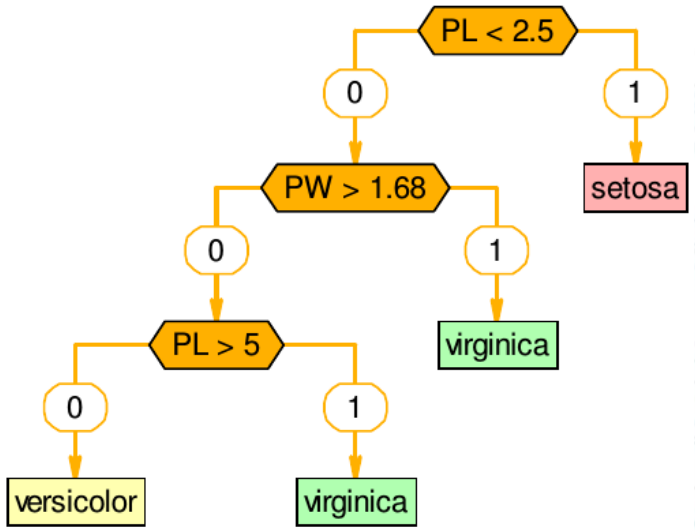
Энтропийный критерий IGain асимптотически эквивалентен статистическому IStat:

$$\mathsf{IStat}(p,n) \to \mathsf{IGain}(p,n) \quad \textit{при } \ell \to \infty$$

Доказательство: применить формулу Стирлинга к критерию IStat.

Решающее дерево → покрывающий набор конъюнкций





setosa	$r_1(x) = [PL \leqslant 2.5]$
virginica	$r_2(x) = [PL > 2.5] \wedge [PW > 1.68]$
virginica	$r_3(x) = [PL > 5] \wedge [PW \leqslant 1.68]$
versicolor	$r_4(x) = [PL > 2.5] \wedge [PL \leqslant 5] \wedge [PW < 1.68]$

Жадный алгоритм построения решающего дерева

- Функция:
- Tree buildTree(U) {
  - Выбор предиката β_v: $I(\beta_v,U) \rightarrow$ max
  - $U_0 := \{ x \in U \mid \beta_v(x) = 0 \}$
  - $U_1 := \{ x \in U \mid \beta_v(x) = 1 \}$
  - Если $|U_0|<\ell_0$ или $|U_1|<\ell_0$ вернуть лист
  - Иначе:
    - L_v := buildTree(U_0)
    - R_v := buildTree(U_1)
- }

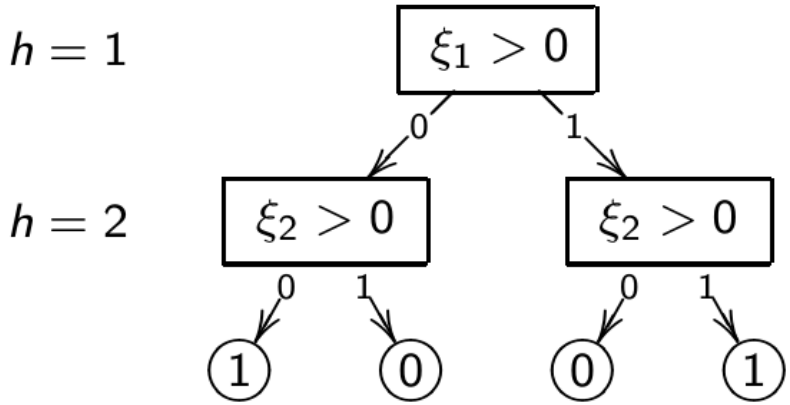
Обобщение на случай задачи регрессии

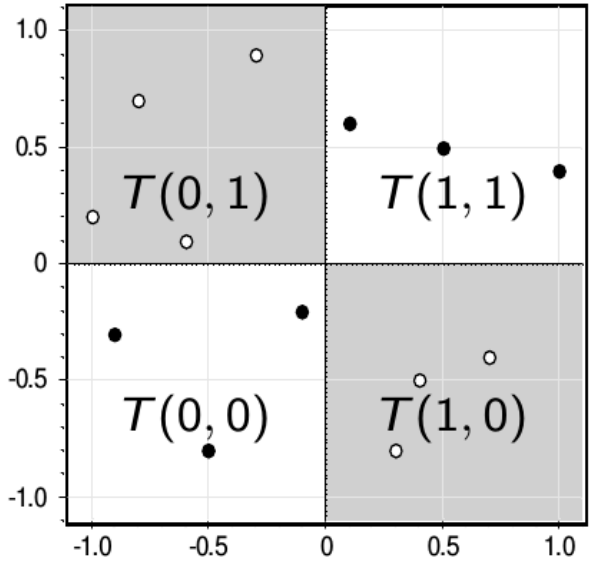
- В каждом листе целевое значение определяется по методу наименьших квадратов
- Критирий информативности – среднеквадратическая ошибка

Небрежные решающие деревья (Oblivious Decision Tree)

- Для всех узлов на глубине h условие ветвления одинаково
- Дерево получается сбалансированным, на глубине h ровно 2^{h-1} вершин

Пример: задача XOR, $H = 2$.





Сравнение алгоритмов

	kNN	Вероятн.	Нейронные	SVM	Деревья (лес)
Качество	не очень	среднее	хорошее	хорошее	хорошее
Трудоемкость настройки	просто	нужно придумать модель	сложно	просто	просто
Переобучение	для малых k	нет	нужны спец. приемы	нет	нет
Большая размерность	проклятие	если нет зависимостей	нужны спец. слои	OK	OK
Маленькие выборки	плохо	Фреквентист. - плохо	нужны пред-обученные сети	OK	OK для Extra Trees
Интерпрети-руемость	понятно	понятно	черн. ящик	понятно	понятно
Нужно нормировать признаки?	да, или подбирать метрику	да	да	да	нет
Скорость обучения/предсказания	∞ / медленно	быстро/ быстро	медленно/ медленно	быстро/ быстро	средне/ быстро